

H. J. Scheefer

Frankfurt 9/11 1977

NICHTADIABATISCHE ERWEITERUNG DES CRANKING-MODELLS

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der

Johann-Wolfgang-Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Hans-Joachim Scheefer

aus

Hanau am Main

Frankfurt am Main

Juni 1977



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

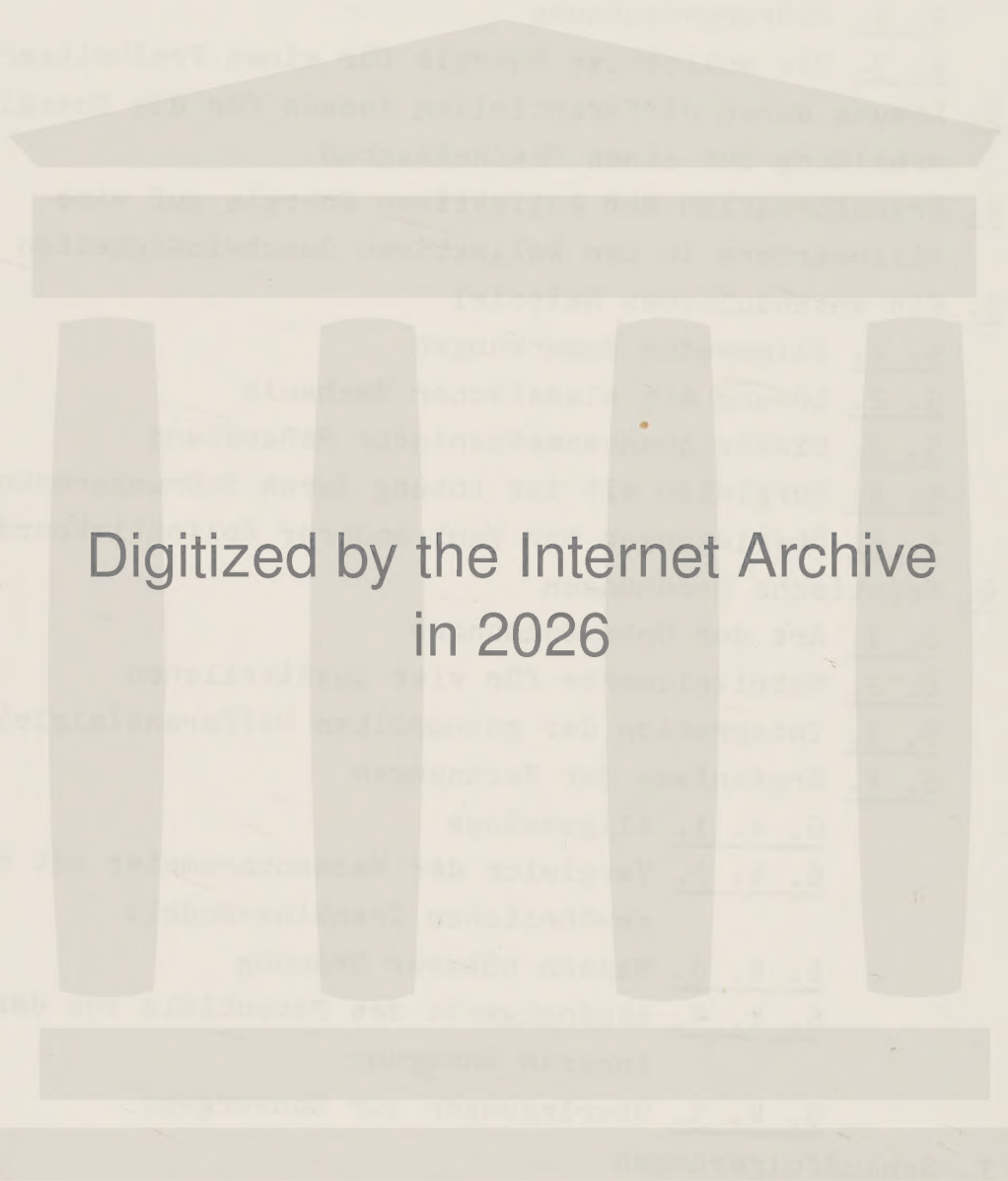
Dekan:	Prof. Dr. R.J. Jelitto
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. W. Greiner
Erstgutachter:	Prof. Dr. W. Greiner
Zweitgutachter:	Prof. Dr. R. Dreizler

Tag der mündlichen Prüfung: 6. 12. 1977

1. Einleitung
2. Das nichtadiabatische Cranking-Modell
 2. 1. Die quasistationäre Schrödingergleichung
 2. 1. 1. Allgemeine Annahmen
 2. 1. 2. Ein einzelner kollektiver Freiheitsgrad
 2. 1. 3. Mehrere Freiheitsgrade
 2. 2. Störungsrechnung
 2. 3. Die kollektive Energie für einen Freiheitsgrad
3. Lösung durch differentiellen Ansatz für die Energieerhaltung für einen Freiheitsgrad
4. Transformation der kollektiven Energie auf eine Bilinearform in den kollektiven Geschwindigkeiten
5. Ein anschauliches Beispiel
 5. 1. Allgemeine Bemerkungen
 5. 2. Lösung mit klassischer Mechanik
 5. 3. Exakte quantenmechanische Behandlung
 5. 4. Vergleich mit der Lösung durch Störungsrechnung
 5. 5. Überlegungen zur Wahl anderer Kollektivkoordinaten
6. Praktische Rechnungen
 6. 1. Art der Untersuchungen
 6. 2. Matrixelemente für vier Quasiteilchen
 6. 3. Integration der gekoppelten Differentialgleichungen
 6. 4. Ergebnisse der Rechnungen
 6. 4. 1. Allgemeines
 6. 4. 2. Vergleich der Massenparameter mit dem gewöhnlichen Cranking-Modell
 6. 4. 3. Massen höherer Ordnung
 6. 4. 4. Abhängigkeit des Potentials von der inneren Anregung
 6. 4. 5. Überlegungen zur Konvergenz
7. Schlußfolgerungen

Anhänge

- A. Allgemeine Lösung für die Lagrangefunktion
- B. Die Normalisierung der gestörten Wellenfunktion
- C. Berechnung der Koeffizienten der gestörten Wellenfunktion
- D. Matrixelemente der vier-Quasiteilchen-Zustände



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550826_0007

Zusammenfassung:

Das Cranking-Modell wird auf den allgemeinen Fall nicht-adiabatischer Bewegung erweitert. Die zeitabhängige Vielkörper-Schroedinger-Gleichung wird gelöst, wobei als Randbedingung die zeitliche Konstanz des Energie-Erwartungswertes angenommen wird. Zur Lösung wird ein Iterationsverfahren vorgeschlagen, dessen nullte Näherung gerade die herkömmliche Cranking-Formel ist. In einem alternativen Ansatz wird die Energieerhaltung in differentieller Form ausgedrückt.

Im Fall eines kollektiven Freiheitsgrades erhält man einen Satz gekoppelter nichtlinearer Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit sowohl für die Koeffizienten der Vielteilchen-Wellenfunktion als auch für die kollektive Variable. Als anschauliches Beispiel werden zwei gekoppelte lineare harmonische Oszillatoren untersucht.

Anschließend werden Massen und Potentiale für die Massenasymmetrie-Schwingungen von Uran-Kernen durchgeführt. Die Abweichungen der Ergebnisse von denen gleichartiger Rechnungen unter Zugrundelegung des herkömmlichen Cranking-Modells werden diskutiert.

Abstract:

The cranking Model is extended to the case of general non-adiabatic motion. The time-dependent many-body Schrodinger equation is solved under the constraint that the expectation value of the energy is constant in time. An iteration procedure is applied, of which the zeroeth order is shown to be the common cranking formula. In an alternative approach the energy conservation is expressed in differential form.

In the case of one collective degree of freedom the method leads to a set of coupled, non-linear, first order differential equations in time for the expansion coefficients of the many-body wave function and for the collective variable. As an illustrative example we solve the case of two coupled harmonic oscillators.

Then the masses and potentials of mass-asymmetry-oscillations in the Uranium-nuclei are calculated. The deviations of the results from those of similar calculations based on the common Cranking model are discussed.

1. Einleitung

Die Methode, die üblicherweise verwendet wird, um die kollektive kinetische Energie eines Kernes zu berechnen, der durch die Kollektivkoordinaten α_i beschrieben wird, ist das Cranking-Modell von Inglis^{9,16,33,34}. In diesem Modell wird die kinetische Energie als Bilinearform in den kollektiven Geschwindigkeiten $\dot{\alpha}_i$ ausgedrückt, wobei die jeweiligen Koeffizienten Massenparameter darstellen, die nur von den Kollektivkoordinaten abhängen. Dieses Modell ist nur im adiabatischen Grenzfall, d.h. für kleine und konstante kollektive Geschwindigkeiten, richtig und wurde in der Literatur ausführlich untersucht^{7,15,23}. Die grundlegende Idee des Modells ist die Annahme, daß zeitliche Änderung des mittleren Einteilchenpotentials - das durch die Koordinaten α_i beschrieben wird - im Vergleich zur Bewegung der Nukleonen in diesem Potential langsam sei. Dies ist richtig, wenn die Einteilchenenergien deutlich größer sind als die kollektive Anregungsenergie. Dann kann man die Zeitabhängigkeit des Einteilchenpotentials als Störung der Einteilchenzustände behandeln. Aus den momentanen Einteilchenzuständen wird die kinetische und potentielle Energie der Kollektivbewegung abgeleitet, aus denen man dann die Massenparameter erhält.

Da viele Kernprozesse nicht adiabatisch verlaufen, insbesondere nicht Kern-Kern-Kollisionen, wurden schon früh Anstrengungen unternommen, diese Einschränkung zu beseitigen. Grumann¹² berücksichtigte bei seinen Rechnungen Terme höherer Ordnung in den kollektiven Geschwindigkeiten $\dot{\alpha}_i$, d.h. Geschwindigkeitsabhängige Massenparameter. Araujo¹ und Marshalek et al.¹⁷ verwendeten die Annahme der Energieerhaltung, beschränkten sich jedoch auf Vibrationsmoden. Weitere Untersuchungen wurden von Wilets et al.³⁵

durchgeführt. Sie beschäftigten sich hauptsächlich mit der Viskosität in nichtadiabatischen Kernprozessen. Eine thermodynamische Behandlung von Reibungsphänomenen bei kollektiven Kernbewegungen wurde von Hofmann¹⁵ durchgeführt. Belyaev⁵ erhielt einen Ausdruck für die kollektive Hamiltonfunktion, indem er von mikroskopischen Ansätzen ausging. Dies führte ihn zu Korrekturtermen zum Cranking-Modell. Baranger und Kumar² behandelten die Kollektivbewegung selbstkonsistent, wobei sie nicht-lineare Störungsrechnung anwandten. Damit vermieden sie die üblichen Einwendungen, die gegen die Cranking-Theorie bezüglich der Selbstkonsistenz gemacht werden. Rowe und Bassermann^{28,29} benutzten den Cranking-Formalismus in Verbindung mit zeitabhängiger Hartree-Fock-Theorie. Ebenfalls mit Hilfe der Hartree-Fock-Theorie berechneten Giannoni et al.¹¹ Quadrupol-Massen für leichte Kerne.

In dieser Arbeit wird eine allgemeine Methode entwickelt, die das Cranking-Modell auf nichtadiabatische Prozesse erweitert. Dazu bringen wir zunächst den exakten mikroskopischen Hamiltonoperator $H(x,p)$, der von den Einteilchenkoordinaten $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ und Einteilchenimpulsen $p = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ abhängt, in eine neue Form. Diese soll zusätzlich noch von den Größen $\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s\}$ abhängen, die für das jeweilige Problem geeignete Funktionen der Einteilchenkoordinaten und -impulse sind

$$\alpha_i = \alpha_i(x,p) \tag{1.1}$$

Die Größen α werden als kollektive Koordinaten interpretiert und können zum Beispiel die Schwerpunktskoordinate, das Quadrupolmoment oder Deformationsparameter sein. Mit diesen

neuen Koordinaten wird nun der Hamiltonoperator umgeschrieben, so daß schließlich folgende Identität gilt

$$H(x,p) = H(x,p,\alpha(x,p)) \quad (1.2)$$

Hierbei ist zu bemerken, daß der Übergang von der linken Seite obiger Gleichung zur rechten Seite eine gewisse Willkürlichkeit besitzt. Willkürliche Teile des Operators H können ausgewählt und durch die α_i ersetzt werden. Auch können beliebige Potentiale, die nur von Potenzen von $\alpha_i - \alpha_i(x,p)$ abhängen, zum Hamiltonoperator addiert werden, ohne daß obige Identität verletzt wird. In der Praxis ersetzt man den exakten Hamiltonoperator durch eine entsprechende Modellvorstellung. So wird zum Beispiel im Quadrupol-Quadrupol-Modell der Hamiltonoperator² als

$$H(x,p) = H_s(x,p) - \frac{1}{2} \lambda [Q(x) \otimes Q(x)]^{[0]} \quad (1.3)$$

angenommen, wobei H_s ein sphärischer Einteilchen-Hamiltonoperator ist und Q den Quadrupoloperator bezeichnet, der durch Einteilchenkoordinaten dargestellt ist. In diesem Fall kann man α_i als $\alpha_i = Q_i(x)$ definieren und H in folgender Form schreiben

$$H(x,p,\alpha) = H_s(x,p) - \frac{1}{2} \lambda [\alpha \otimes \alpha]$$

Um mit dem oben (1.2) spezifizierten Hamiltonoperator Kernbewegungen zu beschreiben, machen wir folgende Annahmen: Wir behandeln die Größen α als unabhängige Koordinaten und erhalten so ein System, welches - wie in der Methode der redundanten Variablen³³ - durch zu viele Freiheitsgrade beschrieben wird. Weiterhin nehmen wir an, daß die Koordinaten α klassische zeitabhängige Größen sind: $\alpha_i = \alpha_i(t)$.

Dann wird das dynamische Verhalten des Kernes durch die zeitabhängige Schroedinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = H(x,p,\alpha(t)) \Psi(x,t) \quad (1.4)$$

beschrieben. Es stellt sich nun die Frage, wie die zeitliche Abhängigkeit der Kollektivkoordinaten α selbstkonsistent bestimmt werden kann. Es ist sicher physikalisch sinnvoll, diese Zeitabhängigkeit aus der Bedingung der Energieerhaltung herzuleiten

$$E = \langle \Psi | H(x,p,\alpha(t)) | \Psi \rangle = \text{const.} \quad (1.5)$$

wobei die Wellenfunktion Ψ die Schroedinger-Gleichung (1.4) erfüllen muß.

Wir werden nun zeigen, daß die Form des Hamilton-Operators so gewählt werden kann, daß die Selbstkonsistenz gewahrt bleibt. Wie von Baranger und Kumar² gezeigt wurde, können Selbstkonsistenz-Bedingungen als

$$\alpha_i(t) = \langle \Psi | \alpha_i(x,p) | \Psi \rangle \quad (1.6)$$

geschrieben werden, wobei die Wellenfunktion Ψ Lösung von (1.4) ist. Eine andere Bedingung ist, daß der Erwartungswert des Hamiltonoperators $H(x,p,\alpha(t))$ der gleiche ist wie der des ursprünglichen Hamiltonoperators

$$\langle \Psi | H(x,p,\alpha(t)) - H(x,p,\alpha(x,p)) | \Psi \rangle \quad (1.7)$$

Wenn wir die oben erwähnte Willkürlichkeit bei der Definition von $H(x,p,\alpha)$ in Betracht ziehen, können wir annehmen, daß $H(x,p,\alpha(t))$ ein zusätzliches Potential enthält, welches die Selbstkonsistenz entsprechend (1.6) oder (1.7) bewirkt. Ein solches Potential kann von der Form

$$\sum_{i=1}^S \mu_i(t) \{ \alpha_i(t) - \alpha_i(x,p) \}$$

sein, wobei $\mu_i(t)$ geeignete zeitabhängige Lagrange-Multiplikatoren sind, die durch die Erfüllung der Selbstkonsistenz-Bedingungen bestimmt werden. Eine angenäherte Erfüllung dieser Bedingungen kann man durch ein Potential der Form

$$\sum_{i=1}^s \mu_i \{ \alpha_i(t) - \alpha_i(x,p) \}^2$$

erzielen, wobei die μ_i positive Konstanten sind.

Im weiteren werden wir immer voraussetzen, daß der Hamiltonoperator bereits entsprechende Randbedingungen enthält, die die Erfüllung der gewünschten Selbstkonsistenz-Bedingungen garantieren. Somit haben wir die zeitabhängige Schroedinger-Gleichung (1.4) für die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ zu lösen. Die Bewegungsgleichungen für die Kollektivkoordinaten $\alpha(t)$ werden dann aus der Energieerhaltung (1.5) hergeleitet, bzw. bei mehr als einer Kollektivkoordinate aus den Lagrange-Gleichungen.

Wie in Kapitel 2. gezeigt wird, nehmen wir aus der Menge der Lösungen für Ψ diejenigen, für die die kollektive Energie E von der Zeit nur implizit als eine Funktion von α und $\dot{\alpha} = \{\dot{\alpha}_1, \dot{\alpha}_2, \dots, \dot{\alpha}_s\}$ abhängt. In diesem Fall ist es möglich, eine geeignete Lagrange-Funktion für die kollektive Bewegung aufzustellen und dann aus den klassischen Lagrange-Gleichungen die Zeitabhängigkeit der Kollektivkoordinaten herzuleiten

$$\ddot{\alpha}_i = - f_i(\alpha, \dot{\alpha}) ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.8)$$

Dabei bedeuten die f_i bestimmte Funktionen von α und $\dot{\alpha}$. Alle höheren zeitlichen Ableitungen der Kollektivkoordinaten können konsistent als Funktionen von α und $\dot{\alpha}$ ausgedrückt werden. Da $\ddot{\alpha}$ über die Lagrange-Gleichungen und die Energie E nichtlinear von der Wellenfunk-

tion Ψ abhängt, muß das System gekoppelter Differentialgleichungen (1.4) und (1.8) näherungsweise gelöst werden. Im allgemeinen Fall ist die Zeitabhängigkeit von $\alpha(t)$ keine harmonische Schwingung. Weiterhin wird gezeigt, daß die gewöhnliche Cranking-Formel bei einer Lösung des Differentialgleichungssystems durch Iteration gerade die nullte Näherung darstellt. Die Lagrange-Funktion, die man dabei erhält, hängt nur von den kollektiven Koordinaten und Geschwindigkeiten ab. Eine solche Lagrange-Funktion ist ein sinnvoller Ausgangspunkt für ein quantisiertes Kollektivmodell, bei dem die Massenparameter durch ein zugrundegelegtes mikroskopisches Modell konsistent bestimmt werden und nicht mehr nur für langsame Geschwindigkeiten gelten, wie dies beim gewöhnlichen Cranking-Modell der Fall ist. Eine Abschätzung des Bereichs zulässiger Geschwindigkeiten wird in Abschnitt 6.4.5. durchgeführt.

In Kapitel 3 wird - für einen Freiheitsgrad - eine Lösungsmöglichkeit gezeigt, die von der Bedingung der Energieerhaltung in differentieller Form ausgeht. Die Differentialgleichungen, die man dabei für $\Psi(x,t)$ und $\alpha(t)$ erhält, können durch Integration gelöst werden, zumindest durch numerische Integration. Anwendungsmöglichkeiten für diese Methode bieten sich bereits in der Theorie der Kernfragmentation¹⁰.

In Kapitel 4 wird die kollektive Energie auf eine Bilinearform in den kollektiven Geschwindigkeiten transformiert. Diese Form ist die Voraussetzung für eine Quantisierung zur Berechnung von Massenausbeuten.

In Kapitel 5 wird die hier entwickelte Methode an dem illustrativen Beispiel eines harmonischen Oszillators getestet, dessen Zentrum selbst wieder eine harmonische Schwingung vollführt. Dies eignet sich deshalb besonders gut als Testfall, weil dafür die Bewegungsgleichungen auch analytisch gelöst werden können.

Schließlich werden in Kapitel 6 mit dem erweiterten Cranking-Modell Rechnungen für den Uran-Kern durchgeführt. Untersucht werden dabei Massenasymetrie-Schwingungen deformierter Uran-Kerne. Grundlage dieser Rechnungen ist die Arbeit von Maruhn²¹, in der mit dem herkömmlichen Cranking-Modell Massenparameter und Massenausbeuten berechnet wurden. Es wird geprüft, welche Abweichungen von den bisherigen Ergebnissen die neuen Zusatzterme zur Cranking-Formel ergeben.

2. Das nichtadiabatische Cranking-Modell

2. 1. Die quasistationäre Schroedinger-Gleichung

2. 1. 1. Allgemeine Annahmen

Die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ kann in zwei Teile zerlegt werden, wobei der erste explizit von der Zeit abhängt, während man vom zweiten voraussetzt, daß er nur von den Einteilchenkoordinaten und den Kollektivkoordinaten sowie deren Ableitungen abhängt. Dabei geht eine implizite Zeitabhängigkeit natürlich über die zeitliche Änderung der Kollektivkoordinaten ein.

$$\Psi(x,t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \epsilon(\tau) d\tau\right\} \Phi(x,\alpha,\dot{\alpha}) \quad (2.1)$$

Der Einfachheit halber vernachlässigen wir zunächst eine mögliche Abhängigkeit von Φ von höheren Ableitungen der kollektiven Koordinaten. Diese Einschränkung ist jedoch nicht prinzipiell, wie später noch gezeigt wird. Weiterhin ist es naheliegend, auch eine implizite Zeitabhängigkeit des Integranden $\epsilon(t) = \epsilon(\alpha,\dot{\alpha})$ anzunehmen.

Setzen wir nun die Wellenfunktion Ψ aus (2.1) in die Schroedinger-Gleichung (1.4) ein, dann erhalten wir eine quasistationäre Wellengleichung

$$\{H(x,\alpha) + \hat{V}(\alpha,\dot{\alpha},\ddot{\alpha})\} \Phi(x,\alpha,\dot{\alpha}) = \epsilon(\alpha,\dot{\alpha}) \Phi(x,\alpha,\dot{\alpha}) \quad (2.2)$$

wobei der Operator $\hat{V}$ implizit von der Zeit abhängt.

$$\hat{V} = -i\hbar \sum_{i=1}^S \left(\dot{\alpha}_i \frac{\partial}{\partial \alpha_i} + \ddot{\alpha}_i \frac{\partial}{\partial \dot{\alpha}_i} \right) \quad (2.3)$$

Damit die Lösung dieser quasi-stationären Schroedinger-Gleichung (2.2) eindeutig bestimmt ist, brauchen wir noch zusätzliche Bedingungen, um die kollektive Beschleunigung

bestimmen zu können, die in $\hat{V}$ als Funktion der kollektiven Koordinaten und Geschwindigkeiten auftritt

$$\ddot{\alpha}_i = -f_i(\alpha, \dot{\alpha}) ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (2.4)$$

Im normalen Cranking-Modell wird nun die kollektive Beschleunigung vernachlässigt. Die quasistationäre Gleichung wird dann mit dem angenäherten Operator

$$\hat{V} \approx -i\hbar \sum_{i=1}^s \dot{\alpha}_i \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \quad (2.5)$$

bis zu Termen zweiter Ordnung mit Hilfe der Störungsrechnung gelöst. Damit ist diese Methode auf adiabatische Probleme beschränkt, bei denen sich die Kollektivkoordinaten im Laufe der Zeit nur langsam ändern. Obwohl diese Näherung kollektive Rotationen und Vibrationen befriedigend beschreibt, gibt es jedoch viele Fälle - wie Schwerionenstreuung und Fusionstheorie - in denen die Voraussetzung der Adiabaticität sicherlich nicht erfüllt ist.

Bevor wir nun eine allgemeine Gleichung für beliebig viele kollektive Koordinaten aufstellen, diskutieren wir zunächst den Fall eines einzelnen kollektiven Freiheitsgrades.

2. 1. 2. ein einzelner kollektiver Freiheitsgrad

In diesem Fall kann die Annahme (2.4) durch die Randbedingung einer zeitlich konstanten Gesamtenergie erfüllt werden: $dE/dt=0$ mit $E=\langle\Phi|H|\Phi\rangle/\langle\Phi|\Phi\rangle$.

Die Energie E hängt nur von α und $\dot{\alpha}$ ab, was mit der Voraussetzung, daß die Funktion Φ auch nur von α und $\dot{\alpha}$ abhängt, konsistent ist. Somit können wir schreiben:

$$\dot{\alpha} \frac{\partial E}{\partial \alpha} + \ddot{\alpha} \frac{\partial E}{\partial \dot{\alpha}} = 0 \quad (2.6)$$

Daraus erhalten wir den gesuchten Zusammenhang (2.4)

$$-\ddot{\alpha} = \dot{\alpha} \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha} \right) / \left(\frac{\partial E}{\partial \dot{\alpha}} \right) = f(\alpha, \dot{\alpha}) \quad (2.7)$$

Hier wird auch deutlich, daß wegen dieser Form von (2.7) die Gleichung (2.2) nichtlinear in Φ ist. Auch ist zu erkennen, daß die oben gemachte Annahme, daß Φ nur von der Kollektivkoordinate und der Kollektivbeschleunigung abhängt, nicht einschränkend ist. Nehmen wir an, Φ hänge auch von höheren Ableitungen von α ab, z.B. bis zur m -ten Ableitung $\alpha^{(m)}$. Dann würde entsprechend der Operator $\hat{V}$ ebenfalls von höheren Ableitungen bis $\alpha^{(m+1)}$ abhängen, die Energie hingegen in Konsistenz mit der Wellenfunktion Φ nur von Ableitungen bis $\alpha^{(m)}$. Damit könnte man aus der Bedingung der Energieerhaltung die $m+1$ -te Ableitung als eine Funktion der niedrigeren Ableitungen ausdrücken und damit eliminieren. Somit würde man eine konsistente quasistationäre Schrödingergleichung erhalten, die Ableitungen der Kollektivkoordinate bis zur Ordnung m enthält.

2. 1. 3. mehrere Freiheitsgrade

Bei mehreren Freiheitsgraden reicht es nicht mehr, als einzige Randbedingung die Energieerhaltung anzunehmen, um die kollektiven Beschleunigungen wie in (2.4) durch die Kollektivkoordinaten und die dazugehörigen Geschwindigkeiten auszudrücken. Die Bewegungsgleichungen (2.4) können durch die Lagrangegleichungen für s Koordinaten

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(\alpha, \dot{\alpha})}{\partial \dot{\alpha}_i} \right) - \frac{\partial L(\alpha, \dot{\alpha})}{\partial \alpha_i} = 0 ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (2.8)$$

wiedergegeben werden, wobei die Lagrangefunktion $L(\alpha, \dot{\alpha})$ durch die klassische Beziehung

$$\sum_{i=1}^s \dot{\alpha}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}_i} - L = E \quad (2.9)$$

aus der Energie $E(\alpha, \dot{\alpha})$ bestimmt wird. Damit ist die Forderung nach der Erhaltung der Energie erfüllt.

Die Bewegungsgleichungen (2.8), die auch in der Form

$$\sum_{k=1}^s \ddot{\alpha}_k \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\alpha}_k \partial \dot{\alpha}_i} + \sum_{k=1}^s \dot{\alpha}_k \frac{\partial^2 L}{\partial \alpha_k \partial \dot{\alpha}_i} - \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = 0 \quad (2.10)$$

geschrieben werden können, werden nun verwendet, um die kollektiven Beschleunigungen in Matrixform zu erhalten

$$\ddot{\alpha} = A(\alpha, \dot{\alpha})^{-1} e(\alpha, \dot{\alpha}) \quad (2.11)$$

Dabei bedeuten

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\alpha}_i \partial \dot{\alpha}_j} \quad (2.12)$$

und

$$e_i = \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} - \sum_{k=1}^s \dot{\alpha}_k \frac{\partial^2 L}{\partial \alpha_k \partial \dot{\alpha}_i} \quad (2.13)$$

Um die Lagrangefunktion aus der Energie E zu berechnen, entwickeln wir diese in eine Potenzreihe nach den kollektiven Geschwindigkeiten

$$E(\alpha, \dot{\alpha}) = E_0(\alpha) + E_2(\alpha, \dot{\alpha}) + E_4(\alpha, \dot{\alpha}) + \dots \quad (2.14)$$

wobei $E_n(\alpha, \dot{\alpha})$ eine homogene Funktion der Ordnung n der Kollektivgeschwindigkeiten ist, nämlich

$$E_n = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^s b_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\alpha) \dot{\alpha}_{i_1} \dot{\alpha}_{i_2} \dots \dot{\alpha}_{i_n} \quad (2.15)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $b_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}$ sind dabei Funktionen der Kollektivkoordinaten. Infolge der Invarianz gegenüber Zeitumkehr erscheinen nur gerade Werte von n . E_0 ist natürlich von den Kollektivgeschwindigkeiten unabhängig und wird gewöhnlich potentielle Energie genannt, während die höheren Terme die kinetische Energie darstellen.

Eulers Theorem für homogene Funktionen liefert uns

$$\sum_{i=1}^s \dot{\alpha}_i \frac{\partial E_n}{\partial \dot{\alpha}_i} = n E_n \quad (2.16)$$

Somit erkennen wir, daß eine mögliche Lösung von (2.9) gegeben ist durch

$$L = g_0 E_0 + g_2 E_2 + g_4 E_4 + \dots \quad (2.17)$$

mit den Koeffizienten

$$g_n = \frac{1}{n-1} \quad (2.18)$$

In Anhang A wird gezeigt, daß die Lagrangefunktion L aus (2.17) tatsächlich die gesuchte Lösung ist.

Unter Anwendung von (2.12) erhalten wir

$$A_{ij} = 2b_{ij}^{(2)} + 4 \sum_{k,l=1}^s b_{ijkl}^{(4)} \dot{\alpha}_k \dot{\alpha}_l + \dots \quad (2.19)$$

Die Inverse der Matrix A, die in (2.11) benötigt wird, kann mit folgendem Ansatz berechnet werden

$$(A^{-1})_{ij} = c_{ij}^{(0)} + \sum_{k,l=1}^S c_{ijkl}^{(2)} \dot{\alpha}_k \dot{\alpha}_l \quad (2.20)$$

Wegen $AA^{-1}=1$ erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{ij}^{(0)} &= \frac{1}{2} (b^{(2)})_{ij}^{-1} \\ c_{ijkl}^{(2)} &= - \sum_{m,n=1}^S (b^{(2)})_{im}^{-1} b_{mnkl}^{(4)} (b^{(2)})_{nj}^{-1} \end{aligned} \quad (2.21)$$

etc. Analog zu dem Fall eines einzelnen kollektiven Freiheitsgrades setzen wir $\ddot{\alpha}$ aus (2.11) in die quasistationäre Schroedingergleichung (2.2) ein. Da die Energie E und damit auch die Lagrangefunktion L durch die Wellenfunktion Φ bestimmt werden, kann die Lösung durch eine Iteration erfolgen.

2. 2. Störungsrechnung

Um die quasistationäre Schroedingergleichung (2.2) durch Störungsrechnung³⁰ zu lösen, ersetzen wir den Operator $\hat{V}$ durch $\lambda\hat{V}$ und drücken Φ und ϵ als eine Potenzreihe in dem Störungsparameter λ aus

$$\Phi = \chi_0 + \lambda\chi_1 + \lambda^2\chi_2 + \dots \quad (2.22)$$

und

$$\epsilon = \epsilon_0 + \lambda\epsilon_1 + \lambda^2\epsilon_2 + \dots \quad (2.23)$$

mit der Bedingung

$$\langle \chi_0 | \chi_j \rangle = 0 ; \quad j = 1, 2, \dots \quad (2.24)$$

Die Wellenfunktion Φ , die wir dadurch erhalten, ist nicht normiert, die Auswirkungen der Normierung werden in Anhang B untersucht. Ersetzen wir nun in (2.2) $\hat{V}$ durch $\lambda\hat{V}$ und setzen jeweils entsprechende Potenzen von λ auf beiden Seiten der Gleichung einander gleich, dann erhalten wir

$$(H - \epsilon_0)\chi_j = (\epsilon_1 - \hat{V})\chi_{j-1} + \epsilon_2\chi_{j-2} + \dots + \epsilon_j\chi_0 \quad (2.25)$$

und

$$\epsilon_j = \langle \chi_0 | \hat{V} | \chi_{j-1} \rangle \quad (2.26)$$

Somit ergibt sich für $j=0$ die Eigenwertgleichung

$$(H - \epsilon_0)\chi_0 = 0 \quad (2.27)$$

χ_0 ist somit ein Eigenzustand des momentanen Hamiltonoperators H . Wir bezeichnen den vollständigen Satz der Eigenfunktionen von H mit $\psi_n(x, \alpha)$ mit den Energien $E_n(\alpha)$

$$H \psi_n = E_n \psi_n \quad (2.28)$$

Als nullte Ordnung der Störungsrechnung wählen wir

$$\chi_0 = \psi_{n_0} ; \quad \epsilon_0 = E_{n_0} \quad (2.29)$$

Normalerweise wird der Grundzustand $n_0=0$ betrachtet. Die Störfunktionen der jeweiligen Ordnung χ_j kann man nun nach der Basis der ungestörten Funktionen entwickeln

$$\chi_j = \sum_n c_n^{(j)} \psi_n \quad (2.30)$$

Aus Gleichung (2.29) erhalten wir

$$c_n^{(0)} = \delta_{nn_0} \quad (2.31)$$

Für $j>0$ liefert die Bedingung (2.24)

$$c_{n_0}^{(j)} = 0 \quad (2.32)$$

Aus (2.25) erhalten wir somit

$$c_n^{(1)} = - \frac{\langle \psi_n | \hat{V} | \psi_{n_0} \rangle}{\Delta_n} ; \quad \Delta_n = E_n - E_{n_0} \quad (2.33)$$

und für $j>1$

$$c_n^{(j)} = - \frac{1}{\Delta_n} \left\{ \sum_{l \neq n_0} \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_l \rangle c_l^{(j-1)} + (\hat{V} - \epsilon_1) c_n^{(j-1)} - \epsilon_2 c_n^{(j-2)} - \dots - \epsilon_{j-1} c_n^{(1)} \right\} \quad (2.34)$$

Auf folgenden Unterschied zum üblichen Vorgehen bei der Anwendung der Störungsrechnung muß noch hingewiesen werden. Gewöhnlich wirkt der Störoperator $\hat{V}$ nur auf die ungestörten Wellenfunktionen ψ_n , nicht jedoch auf die Entwicklungskoeffizienten $c_n^{(j)}$. In unserem Fall trifft diese Annahme jedoch nicht mehr zu, da diese Koeffizienten von α und $\dot{\alpha}$ abhängen und $\hat{V}$ somit auf sie wirken kann.

Die explizite Ausrechnung der Koeffizienten $c_n^{(j)}$, ausgedrückt durch die Matrixelemente $\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \psi_m \rangle$, ist in Anhang C durchgeführt. In den hier folgenden Rechnungen tritt nur das Produkt $|c_n|^2 = c_n^* c_n$ mit

$$c_n = \sum_{j \geq 1} c_n^{(j)} \lambda^j \quad (2.35)$$

auf. Um konsistent zu sein, muß das Produkt $|c_n|^2$ in eine Potenzreihe nach λ entwickelt werden, wobei λ die Ordnung der Störungsrechnung angibt. Nimmt man an, daß die Matrixelemente reell sind (siehe Anhang C), dann verschwinden ungerade Potenzen von λ und wir erhalten

$$|c_n|^2 = \lambda^2 |c_n^{(1)}|^2 + \lambda^4 \{ |c_n^{(2)}|^2 + 2\text{Re}(c_n^{(1)*} c_n^{(3)}) \} + \lambda^6 \dots \quad (2.36a)$$

Die Wellenfunktion ϕ ist durch den Ausdruck

$$\phi = \psi_{n_0} + \sum_{n \neq n_0} c_n \psi_n \quad (2.36b)$$

gegeben. Natürlich sind bisher die Funktionen $f_i(\alpha, \dot{\alpha})$ aus (2.4) immer noch unbekannt. Sie werden im nächsten Abschnitt untersucht.

2. 3. die kollektive Energie für einen Freiheitsgrad

Die kollektive Energie muß nun durch die Koeffizienten der gestörten Wellenfunktion ausgedrückt werden. Mit Gleichung (2.30) erhalten wir die Energie zu

$$E = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \{ E_{n_0} + \sum_{n \neq n_0} |c_n|^2 E_n \} / \langle \Phi | \Phi \rangle \quad (2.37)$$

In obigem Ausdruck haben wir durch die Norm der Wellenfunktion Φ dividiert, weil Φ nicht normiert ist. Damit erhalten wir

$$E = E_{n_0} + \{ \sum_{n \neq n_0} |c_n|^2 E_n \} / \{ 1 + \sum_{n \neq n_0} |c_n|^2 \} \quad (2.38)$$

Mit Hilfe von (2.36) entwickeln wir E nach λ . Führen wir die Rechnung bis zu Termen mit λ^4 konsistent durch, dann ergibt sich

$$E = E_{n_0} + \sum_{n \neq n_0} |c_n^{(1)}|^2 \Delta_n + \sum_{n \neq n_0} \{ |c_n^{(2)}|^2 + 2 \operatorname{Re}(c_n^{(1)} c_n^{(3)}) \} \Delta_n - \sum_{n \neq n_0} |c_n^{(1)}|^2 \cdot \sum_{n \neq n_0} |c_n^{(1)}|^2 \Delta_n \quad (2.39)$$

Hierbei wurde der im letzten Abschnitt eingeführte Parameter $\lambda = 1$ gesetzt.

Der Einfachheit halber beschränken wir uns jetzt auf einen einzigen kollektiven Freiheitsgrad. Die Entwicklung (2.14) von E in eine Potenzreihe nach den Kollektivgeschwindigkeiten liefert dann

$$E = b_0(\alpha) + b_2(\alpha) \dot{\alpha}^2 + b_4(\alpha) \dot{\alpha}^4 + \dots \quad (2.40)$$

Aus (2.39) können die Koeffizienten b_i noch nicht berechnet werden, da die $c_n^{(j)}$ die immer noch unbekannte Funktion $f(\alpha, \dot{\alpha})$ enthalten. Setzt man aber den Ansatz (2.40) in (2.7) ein, dann kann man auch $f(\alpha, \dot{\alpha})$ in eine Potenzreihe nach $\dot{\alpha}$ entwickeln.

$$f(\alpha, \dot{\alpha}) = \frac{b'_0 + b'_2 \dot{\alpha}^2 + b'_4 \dot{\alpha}^4 + \dots}{2b_2 + 4b_4 \dot{\alpha}^2 + 6b_6 \dot{\alpha}^4 + \dots} \quad (2.41)$$

Der Strich kennzeichnet eine Differentiation nach α . Die Entwicklung des Nenners liefert

$$f(\alpha, \dot{\alpha}) = a_0(\alpha) + a_2(\alpha) \dot{\alpha}^2 + a_4(\alpha) \dot{\alpha}^4 + \dots \quad (2.42)$$

mit

$$\begin{aligned} a_0 &= b'_0 / 2b_2 \\ a_2 &= (b'_2 - \frac{2b'_0 b_4}{2b_2}) / 2b_2 \\ a_4 &= (b'_4 - \frac{2b'_2 b_4 + 3b'_0 b_6}{b_2} + \frac{4b'_0 b_4^2}{b_2^2}) / 2b_2 \end{aligned} \quad (2.43)$$

Mit diesem Ausdruck können wir nun endlich die Koeffizienten $c_n^{(j)}$ gemäß (2.34) bzw. (C.5) in eine Potenzreihe in $\dot{\alpha}$ entwickeln. Setzen wir das Ergebnis in (2.39) ein, dann erhalten wir die folgende Beziehung zwischen den Koeffizienten b_i und a_i

$$\begin{aligned} b_0 &= E_{n_0} + \sum_{n \neq n_0} A_{1n} \Delta_n \\ b_2 &= \sum_{n \neq n_0} A_{2n} \Delta_n + \sum_{n \neq n_0} A_{3n} \Delta_n \\ b_4 &= \sum_{n \neq n_0} A_{4n} \Delta_n - \left(\sum_{n \neq n_0} A_{2n} \Delta_n \right) \cdot \left(\sum_{n \neq n_0} A_{2n} \right) \end{aligned} \quad (2.44)$$

Die Koeffizienten A_{in} sind Abkürzungen für die untenstehenden Ausdrücke, in denen die K_{ijn} nur verschiedene Übergangsmatrixelemente enthalten und in Anhang C angegeben sind.

$$\begin{aligned}
 A_{1n} &= a_o^2 K_{21n}^2 \\
 A_{2n} &= K_{11n}^2 \\
 A_{3n} &= 2a_o (K_{21n} K_{22n} + K_{11n} K_{31n}) + 2a_o' K_{11n} K_{32n} \\
 &\quad + 2a_o a_2 (K_{21n}^2 - 2K_{11n} K_{32n}) \\
 A_{4n} &= (K_{22n}^2 + 2K_{11n} K_{33n}) + 2a_2 (K_{21n} K_{22n} + K_{11n} K_{31n}) \\
 &\quad + 2a_2' K_{11n} K_{32n} + (a_2^2 + 2a_o a_4) (K_{21n}^2 - 4K_{11n} K_{32n})
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Ist die Beschleunigung $f(\alpha, \dot{\alpha}) = a_i \equiv 0$, dann stellt der Koeffizient $2b_2$ gerade die übliche Cranking-Masse dar:

$$B = 2b_2 = 2 \sum_{n \neq n_o} K_{11n}^2 \Delta_n = 2\hbar^2 \sum_{n \neq n_o} \frac{|\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \psi_{n_o} \rangle|^2}{\Delta_n} \tag{2.46}$$

Die Gleichungen (2.43) und (2.44) stellen ein System gekoppelter Differentialgleichungen für die Koeffizienten a_i und b_i dar. Dieses System kann z. B. durch Iteration gelöst werden. Natürlich wäre es prinzipiell auch möglich, die Gleichungen analytisch zu entkoppeln. Man erhält dabei nichtlineare Differentialgleichungen in α , die schwierig zu lösen sind. Eine sehr geeignete nullte Näherung für eine Iteration stellt das normale Cranking-Modell für konstante Geschwindigkeit dar, das lediglich auf höhere Terme in $\dot{\alpha}$ erweitert ist¹². Die nullte Näherung lautet

$$\begin{aligned}
 b_o^{(0)} &= E_{n_o} \\
 b_2^{(0)} &= \sum_{n \neq n_o} A_{2n} \Delta_n = B/2
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

$$b_4^{(0)} = \sum_{n \neq n_o} (K_{22n}^2 + 2K_{11n} K_{33n}) \Delta_n - \left(\sum_{n \neq n_o} A_{2n} \Delta_n \right) \cdot \left(\sum_{n \neq n_o} A_{2n} \right)$$

und

$$a_1^{(0)} = 0 \tag{2.48}$$

Die erste Näherung für die a_i erhält man dann, indem man die $b_i^{(0)}$ in (2.43) einsetzt, zu

$$\begin{aligned} a_0^{(1)} &= E'_{n_0} / B \\ a_2^{(1)} &= B' / 2B - 4E'_{n_0} b_4^{(0)} / B^2 \\ a_4^{(1)} &= (b_4^{(0)})' - 2B' b_4^{(0)} / B + 16E'_{n_0} b_4^{(0)2} / B^2 / B \end{aligned} \quad (2.49)$$

Das Ergebnis entspricht der Bewegungsgleichung (2.17)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}} = \frac{\partial L}{\partial \alpha} \quad (2.50)$$

wobei die Lagrangefunktion L in Übereinstimmung mit (2.17) bis zu Termen in $\dot{\alpha}^4$ exakt ist

$$L = \frac{1}{2} B \dot{\alpha}^2 + \frac{1}{3} b_4^{(0)} \dot{\alpha}^4 - E_{n_0} \quad (2.51)$$

In aktuellen Problemen kann die Iteration numerisch durchgeführt werden. Eine Möglichkeit zur direkten numerischen Integration der gekoppelten Differentialgleichungen wird in Kapitel 6.3. entwickelt.

Interessanterweise kann man aus (2.29) erkennen, daß der geschwindigkeitsunabhängige Teil der Beschleunigung, $a_0^{(1)}$, gerade proportional zum Gradienten des Potentials $E_{n_0}(\alpha)$ ist, während höhere Terme infolge der Abhängigkeit der Masse von der Kollektivkoordinate und -geschwindigkeit auftreten.

3. Lösung durch differentiellen Ansatz für die Energieerhaltung für einen Freiheitsgrad

Wir machen nun keinen ad-hoc-Ansatz wie (2.1) für die Wellenfunktion $\psi(x,t)$. Vielmehr gehen wir von der Bedingung der Energieerhaltung in differentieller Form $dE/dt=0$ aus. Entsprechend der zeitlichen Ableitung eines Erwartungswertes können wir schreiben

$$\frac{dE}{dt} = \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial t} | \psi \rangle = \sum_{i=1}^s \dot{\alpha}_i \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} | \psi \rangle \quad (3.1)$$

wobei der zusätzlich auftretende Term $\langle \psi | [H, H] | \psi \rangle / i\hbar$ verschwindet. Um die Erhaltung der Energie zu gewährleisten, genügt es,

$$\langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} | \psi \rangle = 0 ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.2)$$

anzunehmen. Dazu gibt es s Randbedingungen, die im allgemeinen nicht mit den s Lagrangegleichungen aus (2.8) äquivalent sind. Die Bewegungsgleichungen, die zu den Lagrangegleichungen äquivalent sind, können in der Form

$$\langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} | \psi \rangle = F_i(\alpha, \dot{\alpha}) ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.3)$$

geschrieben werden, wobei die F_i Zwangskräfte sind, die keine Arbeit verrichten:

$$\sum_{i=1}^s F_i \dot{\alpha}_i = 0 \quad (3.4)$$

Wir suchen nun nach möglichen nichtstatischen Lösungen, d.h. es soll $\dot{\alpha} \neq 0$ gelten. Somit ist im Falle eines einzelnen kollektiven Freiheitsgrades offensichtlich, daß $F_1=0$ gelten muß, bei mehreren Freiheitsgraden ist dies nicht zwingend.

Im Falle eines einzelnen Freiheitsgrades haben wir somit

$$\langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \alpha} | \psi \rangle = 0 \quad (3.5)$$

Durch Bilden der zeitlichen Ableitung erhalten wir

$$\dot{\alpha} \langle \psi | \frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\frac{\partial H}{\partial \alpha}, H] | \psi \rangle = 0 \quad (3.6)$$

Diese Gleichung muß simultan mit der zeitabhängigen Schroedingergleichung (1.4) gelöst werden. Wir entwickeln die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ in einer geeigneten Basis, die aus orthonormalen Vielteilchen-Wellenfunktionen $\psi_n(x,t)$ besteht, die zeitabhängig sein können.

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n(t) \cdot \psi_n(x,t) \quad (3.7)$$

Setzen wir nun (3.7) in die Schroedingergleichung (1.4) ein, dann erhalten wir Differentialgleichungen für die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten $a_n(t)$

$$i\hbar \dot{a}_n = \sum_l \langle \psi_n | (H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) | \psi_l \rangle a_l \quad (3.8)$$

Die Substitution von (3.7) in (3.6) schließlich ergibt

$$\begin{aligned} \dot{\alpha} \sum_{l,n} a_l^* a_n \langle \psi_l | \frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} | \psi_n \rangle + \\ + \frac{1}{i\hbar} \sum_{l,n} a_l^* a_n \langle \psi_l | [\frac{\partial H}{\partial \alpha}, H] | \psi_n \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Gleichungen (3.8) und (3.9) sind gekoppelte, nichtlineare Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit für die Entwicklungskoeffizienten und die kollektive Variable. Sie können zumindest numerisch integriert werden. Diese Integration würde $a_n = a_n(t)$ und $\alpha = \alpha(t)$ und damit die kollektive Bewegung des Systems liefern.

Die Wellenfunktion ψ muß noch die Anfangsbedingung

$$\langle \psi(t=0) | \frac{\partial H}{\partial \alpha} | \psi(t=0) \rangle = 0 \quad (3.10)$$

erfüllen. Wir betrachten zunächst die statische Lösung $\dot{\alpha} \equiv 0$ und anschließend die nichtstatische Lösung $\dot{\alpha} \neq 0$.

Wir wählen einen Eigenzustand $\psi_n(x, \alpha)$ des momentanen Hamiltonoperators als Ausgangsfunktion

$$H \psi_n = E_n(\alpha) \psi_n \quad (3.11)$$

Dieser Eigenzustand erfüllt die Anfangsbedingung (3.10) nur für bestimmte Werte von α . Man sieht leicht, daß

$$\langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial \alpha} | \psi_n \rangle = \frac{d}{d\alpha} E_n(\alpha) \quad (3.12)$$

gilt. Deshalb wird die Anfangsbedingung (3.10) in den Extrempunkten des Potentials E_n erfüllt

$$\frac{d}{d\alpha} E_n(\alpha) = 0 \quad (3.13)$$

Beginnen wir die Integration der Bewegungsgleichungen mit

$$\psi(x, t=0) = \psi_n(x, \alpha) \quad (3.14)$$

wo α der Extremwertbedingung (3.13) gehorcht, dann erhalten wir die statische Lösung $\dot{\alpha} \equiv 0$.

Es ist möglich, die Anfangsbedingungen (3.10) zu erfüllen, indem man mit einem Zustand $\tilde{\psi}_n(x, \alpha)$ beginnt. Diese Zustände und die zugehörige effektive Potentialfläche $E_n(\alpha)$ werden durch eine Minimierungsprozedur

$$\tilde{E}_n(\alpha) = \min \langle \tilde{\psi}_n | H | \tilde{\psi}_n \rangle \quad (3.15)$$

bestimmt mit der Einschränkung

$$\langle \tilde{\psi}_n | \frac{\partial H}{\partial \alpha} | \tilde{\psi}_n \rangle = 0 \quad (3.16)$$

und der Orthonormalitätsbedingung

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_n \rangle = \delta_{1n} \quad (3.17)$$

Dieses Minimierungsproblem kann entsprechend der Methode der Lagrange-Multiplikatoren behandelt werden. Somit suchen wir für $n=0$ nach dem Grundzustand des effektiven Hamiltonoperators

$$\tilde{H}(x, \alpha, \mu) = H(x, \alpha) + \mu \frac{\partial H(x, \alpha)}{\partial \alpha} \quad (3.18)$$

wobei μ der geeignete Lagrangemultiplikator ist, der gemäß der Bedingung (3.10) bestimmt wird.

4. Transformation der kollektiven Energie auf eine Bilinearform in den kollektiven Geschwindigkeiten

In einfachen Fällen - wie in dem Beispiel, das im nächsten Kapitel vorgestellt wird - ist es möglich, daß wir die Energie als quadratische Funktion der kollektiven Geschwindigkeit $\dot{\alpha}$ erhalten, genauso wie dies im üblichen Cranking-Modell der Fall ist. Normalerweise jedoch treten höhere Potenzen der kollektiven Geschwindigkeit auf, wie nach (2.14) zu erwarten ist. Im folgenden diskutieren wir eine Transformation, die von α und $\dot{\alpha}$ abhängt und die Kollektivkoordinate α auf eine neue Koordinate β transformiert, wobei die Bedingung zu erfüllen ist, daß die Energie in der neuen Koordinate eine einfache Bilinearform der Kollektivgeschwindigkeiten ist. Ist dies erreicht, dann kann die neue kollektive Hamiltonfunktion wie üblich quantisiert werden^{14,27}. Kollektive Hamiltonfunktionen, die bilinear in den Impulsen sind, können von der mikroskopischen Hamiltonfunktion durch kanonische Transformationen zwischen Einteilchenkoordinaten und Kollektivkoordinaten abgeleitet werden.

Beschränken wir uns auf einen Freiheitsgrad, so ist die Reihenentwicklung der kollektiven Energie gegeben durch

$$E = b_0(\alpha) + b_2(\alpha)\dot{\alpha}^2 + b_4(\alpha)\dot{\alpha}^4 + \dots \quad (4.1)$$

Die gewünschte Form der kollektiven Energie in der Koordinate β ist

$$E = q_0(\beta) + q_2(\beta)\dot{\beta}^2 \quad (4.2)$$

Entwickeln wir $\beta(\alpha, \dot{\alpha})$ in eine Potenzreihe in $\dot{\alpha}$, so erhalten wir

$$\beta = \alpha + g_2(\alpha)\dot{\alpha}^2 + g_4(\alpha)\dot{\alpha}^4 + \dots \quad (4.3)$$

Dabei haben wir $\beta(\alpha, \dot{\alpha}=0) = \alpha$ angenommen. Differenzieren wir diese Gleichung nach der Zeit und substituieren wir $\ddot{\alpha}$ aus (2.24), so erhalten wir für $\dot{\beta}$ schließlich

$$\dot{\beta} = \dot{\alpha}\{(1-2g_2a_0) + (g_2'-2g_2a_2-4g_4a_0)\dot{\alpha}^2 + \dots\} \quad (4.4)$$

Auch die q_0 und q_2 aus (4.2) können wir in eine Potenzreihe nach $\dot{\alpha}$ entwickeln:

$$q_k(\beta) = q_k(\beta(\alpha, \dot{\alpha}=0)) + \dots + \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^n q_k(\beta(\alpha, \dot{\alpha}))}{\partial \dot{\alpha}^n} \right]_{\dot{\alpha}=0} \dot{\alpha}^n + \dots \quad (4.5)$$

Die Energie in (4.2) erhalten wir dann mit (4.3), (4.4) und (4.5) zu

$$E = q_0(\alpha) + q_2(\alpha)\dot{\alpha}^2 + g_4(\alpha)\{q_0'(\alpha) - 8a_0(\alpha)q_2(\alpha)\}\dot{\alpha}^4 + \dots \quad (4.6)$$

wobei wir der Einfachheit halber $g_2(\alpha) = 0$ angenommen haben. Vergleichen wir die beiden Ausdrücke für die Energie (4.6) und (4.1) miteinander, dann erhalten wir

$$q_0(\alpha) = b_0(\alpha) ; \quad q_2(\alpha) = b_2(\alpha) \quad (4.7)$$

Die kollektive Energie in der Koordinate β hat somit die Form

$$E = b_0(\beta) + b_2(\beta)\dot{\beta}^2 \quad (4.8)$$

Für die g_k erhalten wir

$$g_4\{b_0'(\alpha) - 8a_0(\alpha)b_2(\alpha)\} = b_4(\alpha) \quad (4.9)$$

etc. Benutzen wir die Relation (2.43), dann lautet die letzte Gleichung

$$g_4(\alpha) = -\frac{1}{3} \frac{b_4(\alpha)}{b_0'(\alpha)} \quad (4.10)$$

Um die Wellenfunktion Φ aus (2.1) sowie die Erwartungswerte usw. in der Koordinate β auszudrücken, benötigen wir die zu (4.3) inverse Transformation $\alpha = \alpha(\beta, \dot{\beta})$. Gleichung (4.3) mit $g_2(\alpha) = 0$ kann invertiert werden, indem man $\alpha(\beta, \dot{\beta})$ in eine Potenzreihe nach $\dot{\beta}$ entwickelt

$$\alpha = \beta + h_4(\beta)\dot{\beta}^4 + h_6(\beta)\dot{\beta}^6 + \dots \quad (4.11)$$

Analog zu (4.4) kann man schreiben

$$\ddot{\alpha} = \dot{\beta} \{ 1 + 4h_4(\beta)\dot{\beta}^2 + \dots \} \quad (4.12)$$

Die zweite Ableitung $\ddot{\beta}$ kann als Funktion von β und $\dot{\beta}$ ausgedrückt werden, wenn man die Bedingung der Erhaltung der Energie verwendet.

$$-\ddot{\beta} = \frac{b'_0(\beta)}{2b_2(\beta)} + \frac{b'_2(\beta)}{2b_2(\beta)}\dot{\beta}^2 = a_0(\beta) + \frac{b'_2(\beta)}{2b_2(\beta)}\dot{\beta}^2 \quad (4.13)$$

Nun setzen wir (4.13) in (4.12) ein. In (4.3) ersetzen wir α durch (4.11) und die Potenzen von $\dot{\alpha}$ durch die entsprechenden Potenzen von (4.12). Durch Koeffizientenvergleich und mit der oben gemachten Annahme $g_2 = 0$ erhalten wir schließlich

$$h_4(\beta) = -g_4(\beta) \quad (4.14)$$

$$h_6(\beta) = -16g_4^2(\beta) \cdot a_0(\beta) - g_6(\beta)$$

usw.

5. Ein anschauliches Beispiel

5. 1. Allgemeine Bemerkungen

Das Verfahren, das in Kapitel 2. dargestellt wurde, wird jetzt an einem einfachen Modell getestet, in dem alle Rechnungen analytisch ausgeführt werden können. Wir nehmen an, daß ein Teilchen der Masse M sich in einem masselosen Rahmen unter dem Einfluß der Kraft einer Feder mit der Federkonstanten k_1 bewegt. Der Rahmen selbst schwingt unter dem Einfluß einer zweiten Feder mit der Konstanten k_2 . Die Lage von Masse und Rahmen wird durch die Koordinaten x und α angegeben. Die Bewegung des Teilchens innerhalb des Rahmens kann nun als Einteilchenbewegung angesehen werden, während die Bewegung des Rahmens die Kollektivbewegung darstellt. In der Betrachtungsweise des Kollektivmodells wird nur die Bewegung des Rahmens betrachtet, nicht jedoch die Bewegung des Teilchens selbst. Das Modell ist in Fig. 1 skizziert, das dazugehörige Potential wird in Fig. 2 gezeigt.

Die Frequenzen, die zu den einzelnen Bewegungen gehören, sind

$$\omega_1^2 = k_1/M ; \quad \omega_2^2 = k_2/M \quad (5.1)$$

Das Verhältnis

$$\eta = k_2/k_1 = \omega_2^2/\omega_1^2 \quad (5.2)$$

kann man als Adiabasie-Parameter bezeichnen, da er ein Kriterium für die Anwendbarkeit der adiabatischen Näherung darstellt, wie aus den Ergebnissen deutlich wird. Der Hamilton-Operator des Systems ist durch

$$H(x, \alpha) = \frac{p^2}{2M} + \frac{k_1}{2}(x-\alpha)^2 + \frac{k_2}{2}\alpha^2 \quad (5.3)$$

gegeben. Wir werden das Problem zunächst klassisch behandeln und dann quantenmechanisch lösen.

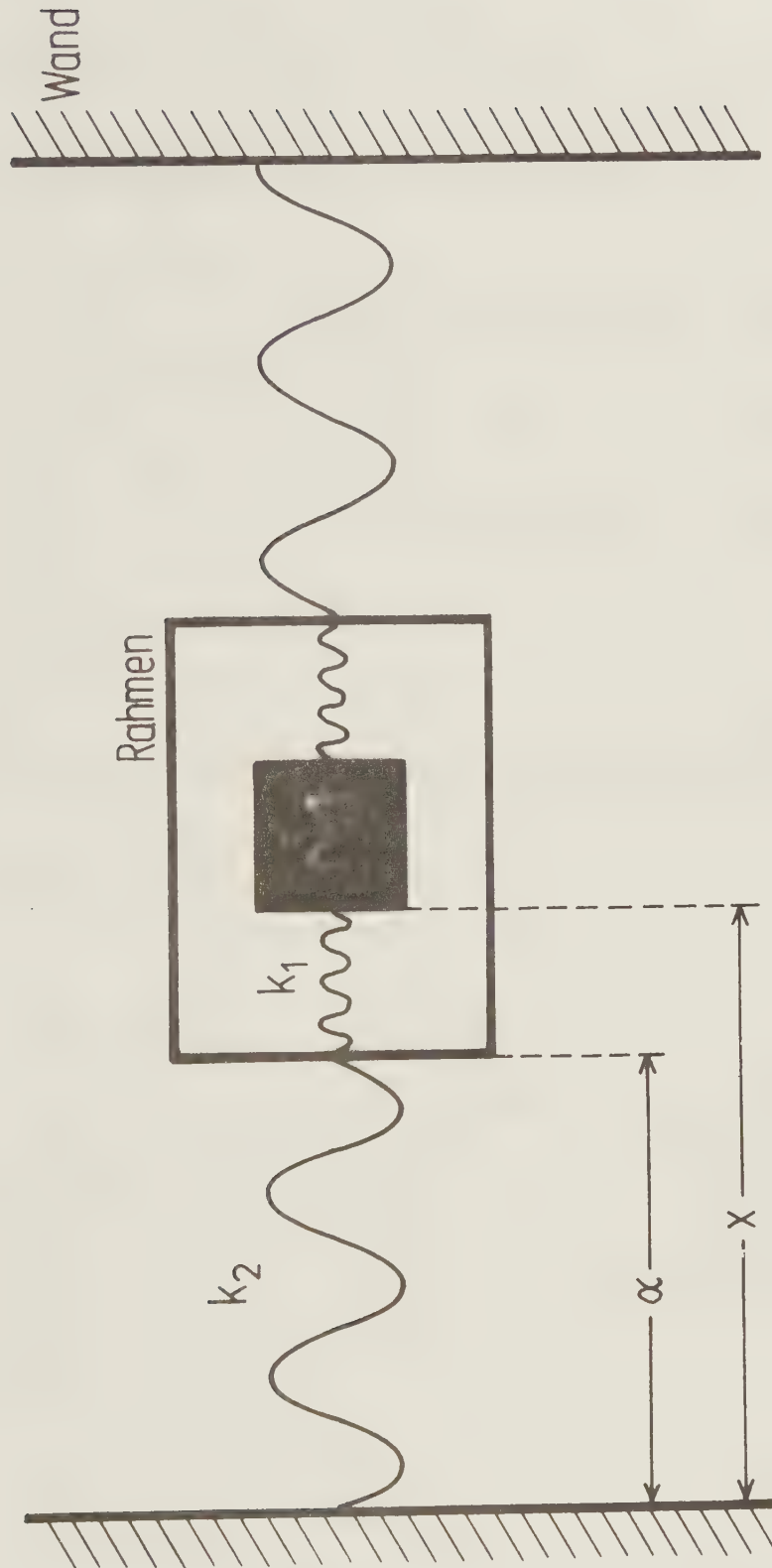


Fig. 1 Ein einfaches Modell zum nichtadiabatischen Cranking-Modell. Die Masse M oszilliert in einem masselosen Rahmen mit der Federkonstanten k_1 . Der Rahmen selbst schwingt unter Einfluß der Federkonstanten k_2 . Die Auslenkung des Rahmens wird mit α bezeichnet, die der Masse mit x . Im Kollektivmodell interessiert man sich nur für die Bewegung des "Rahmens", nicht jedoch für die Borgänge innerhalb desselben.

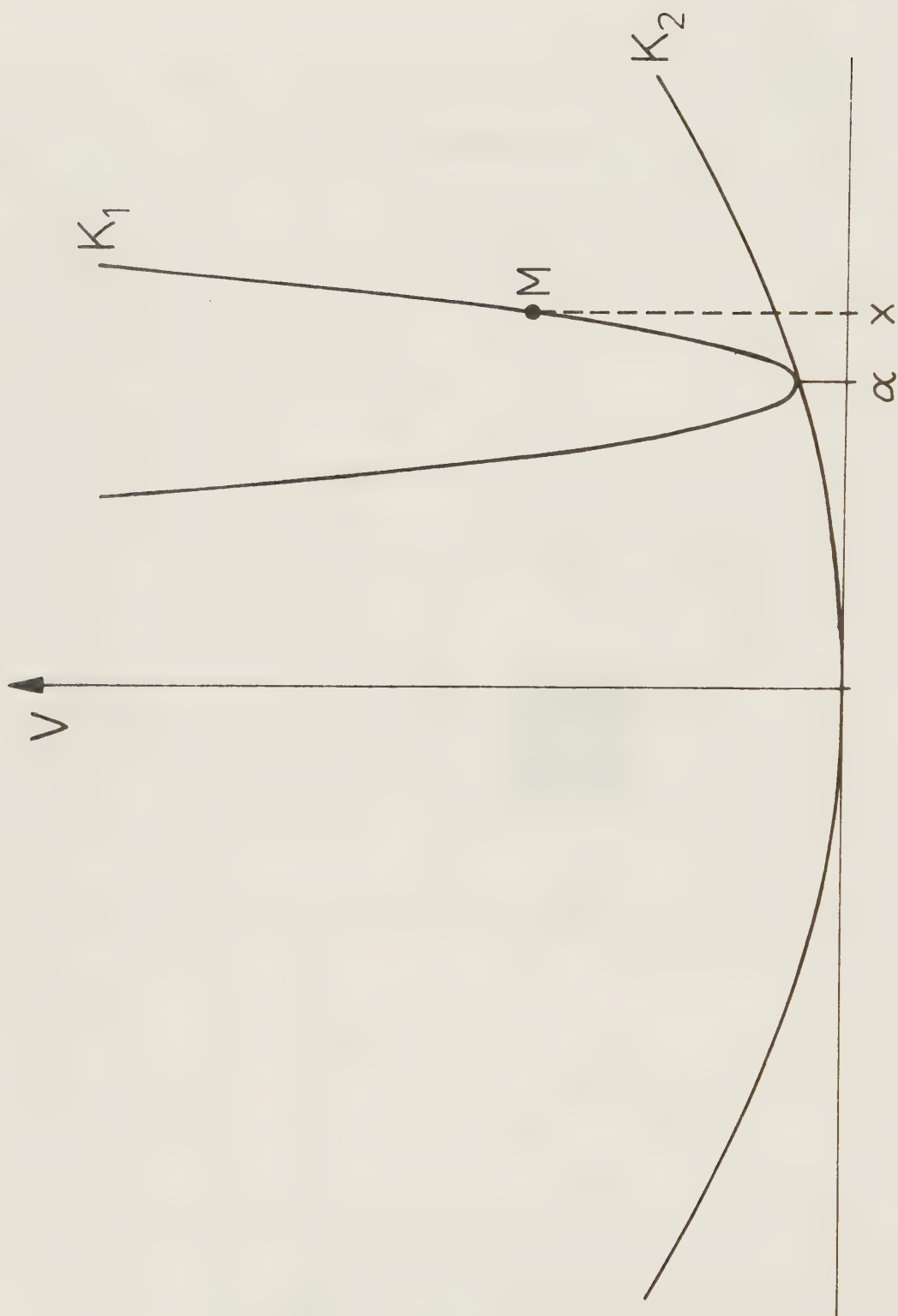


Fig. 2 Das Potential zum Modell in Figur 1.

5. 2. Lösung mit klassischer Mechanik

Mit der Lagrange-Funktion $L = T - V$ erhalten wir die Bewegungsgleichungen für x und α

$$k_1(x-\alpha) + M\ddot{x} = 0 \quad (5.4)$$

$$-k_1(x-\alpha) + k_2\alpha = 0$$

Entkoppeln dieser Gleichungen liefert für die Beschleunigung

$$\ddot{\alpha} = -\omega^2 \alpha \quad (5.5)$$

mit der Frequenz

$$\omega^2 = \omega_2^2(1+\eta)^{-1} \quad (5.6)$$

Die Energie des Systems, durch α und $\dot{\alpha}$ ausgedrückt, lautet

$$E = \frac{\tilde{M}}{2} \dot{\alpha}^2 + \frac{\tilde{k}}{2} \alpha^2 \quad (5.7)$$

mit

$$\tilde{M} = M(1+\eta)^2 ; \quad \tilde{k} = k_2(1+\eta) \quad (5.8)$$

Somit kann die Bewegung des Systems, wenn man lediglich den masselosen Rahmen betrachtet, der allein durch die Koordinate α beschrieben wird, als die Schwingung eines Teilchens mit der effektiven Masse $\tilde{M}$ angesehen werden, die in einem harmonischen Oszillatorpotential mit der Federkonstanten $\tilde{k}$ oszilliert.

5. 3. Exakte quantenmechanische Behandlung

Im folgenden wird die Methode angewendet, die in Kapitel 3. hergeleitet wurde. Dazu lösen wir die Schroedingergleichung (1.4) mit der Bedingung der Energieerhaltung in differentieller Form (3.6). Um mögliche Ausgangsfunktionen $\psi_n(x, \alpha)$ zu finden, konstruieren wir den effektiven Hamiltonoperator $\tilde{H}$ entsprechend Gleichung (3.18). Wenn wir (5.3) nach α differenzieren, erhalten wir

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha} = -k_1(x - \alpha) + k_2\alpha \quad (5.9)$$

Der effektive Hamiltonoperator kann dann als

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2M} + \frac{k_1}{2}(x - \alpha - \mu)^2 + \frac{k_2}{2}\alpha^2 - \frac{k_1}{2}\mu^2 + k_2\alpha\mu \quad (5.10)$$

geschrieben werden. Somit sind die Eigenzustände $\tilde{\psi}_n$ von $\tilde{H}$ harmonische Oszillator-Wellenfunktionen, die mit $\psi_n(x - \alpha - \mu)$ bezeichnet werden. Die Eigenwerte $\tilde{E}_n$ hängen von n , α und μ ab

$$\tilde{E}_n = \hbar\omega_1 \cdot (n + \frac{1}{2}) + \frac{k_2}{2}\alpha^2 - \frac{k_1}{2}\mu^2 + k_2\alpha\mu \quad (5.11)$$

Der Lagrange-Multiplikator μ wird durch die Bedingung (3.16) bestimmt, die

$$\mu = \eta\alpha \quad (5.12)$$

lautet, da der Erwartungswert von $\partial H / \partial \alpha$ mit der Wellenfunktion $\tilde{\psi}$ verschwindet

$$\tilde{\psi}_n = \psi_n(x - \tilde{\alpha}) ; \quad \tilde{\alpha} = \alpha(1 + \eta) \quad (5.13)$$

Die Substitution von $\mu = \eta\alpha$ in Gleichung (5.11) ergibt für das effektive Potential

$$\tilde{E}_n(\alpha) = \hbar\omega_1(n + \frac{1}{2}) + \frac{\tilde{k}}{2}\alpha^2 \quad (5.14)$$

Der Unterschied zwischen diesem effektiven Potential und dem klassischen effektiven Potential (5.7) besteht somit in der zusätzlichen quantenmechanischen Energie $\hbar\omega_1(n+1/2)$. Als nächstes müssen wir die Differentialgleichung (3.6) für die α -Bewegung simultan mit der Schroedingergleichung (1.4) lösen. In unserem Beispiel können wir diese beiden Probleme separieren. Als erstes berechnen wir die α -Bewegung und dann, wenn $\alpha=\alpha(t)$ bekannt ist, setzen wir es in den Hamiltonoperator H ein und berechnen die Wellenfunktion ψ .

Aus den Gleichungen (5.3) und (5.9) erhalten wir

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} = k_1 + k_2 ; \quad \left[\frac{\partial H}{\partial \alpha}, H \right] = -i\hbar\omega_1^2 p$$

wodurch aus (3.6) folgt

$$\dot{\alpha} = \frac{1}{M(1+\eta)} \langle \psi | p | \psi \rangle \quad (5.15)$$

Differenzieren wir nun (5.15) nach der Zeit, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \ddot{\alpha} &= \frac{1}{i\hbar M(1+\eta)} \langle \psi | [p, H] | \psi \rangle \\ &= -\frac{1}{M(1+\eta)} \langle \psi | k_1(x-\alpha) | \psi \rangle = -\omega^2 \alpha \end{aligned} \quad (5.16)$$

da wegen der Energieerhaltung $\langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \alpha} | \psi \rangle = 0$ die folgende Relation gilt

$$\langle \psi | k_1(x-\alpha) | \psi \rangle = k_2 \alpha \quad (5.17)$$

Für die Zeitabhängigkeit von α erhalten wir somit - genau wie im klassischen Fall (5.5) - eine harmonische Schwingung.

Als Anfangsbedingung nehmen wir $\alpha(t=0) = \alpha_0$ an. Setzen wir die Ausgangsbedingung

$$\psi(x, t=0) = \psi_{n_0}(x - \tilde{\alpha}_0) ; \quad \tilde{\alpha}_0 = \alpha_0(1+\eta) \quad (5.18)$$

in Gleichung (5.15) ein, so erhalten wir

$$\dot{\alpha}(t=0) = \frac{1}{M(1+\eta)} \langle \Psi_{n_0} | p | \Psi_{n_0} \rangle = 0 \quad (5.19)$$

Somit wird $\alpha(t)$ gegeben durch $\alpha(t) = \alpha_0 \cos \omega t$. Die Energie ist dann

$$E = \hbar \omega_1 \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar}{2} \dot{\alpha}^2 + \frac{\tilde{M}}{2} \dot{\alpha}^2 \quad (5.20)$$

Nun kann man $\alpha(t) = \alpha_0 \cos \omega t$ in die Schroedingergleichung (1.4) einsetzen und diese mit der Anfangsbedingung (5.18) lösen. Wir können $\Psi(x,t)$ mit der Methode von Parker²⁵ berechnen, der dieses Problem für einen harmonischen Oszillator in einem gleichförmigen zeitlich veränderlichen elektrischen Feld behandelte.

$$\Psi(x,t) = e^{-i\delta/\hbar} e^{i\tilde{p}x/\hbar} \Psi_{n_0}(x-\tilde{\alpha}) \quad (5.21)$$

mit

$$\tilde{p} = M\dot{\tilde{\alpha}} ; \quad \delta = \hbar \omega_1 \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) t + \frac{1}{2} \tilde{p} \tilde{\alpha} \quad (5.22)$$

Setzen wir nun $\Psi(x,t)$ aus (5.21) in die Schroedingergleichung (1.4) ein, so können wir direkt das Ergebnis verifizieren. Wir sehen, daß sich keine stationären Zustände bilden. $|\Psi(x,t)|^2$ oszilliert mit der Frequenz ω und der Amplitude $\tilde{\alpha}_0$ um $x=0$.

5. 4. Vergleich mit der Lösung durch Störungsrechnung

Nun vergleichen wir die exakten Resultate mit den Ergebnissen, die wir durch Anwendung der Störungsrechnung - wie in Kapitel 2. beschrieben - erhalten. Als erstes lösen wir das momentane Problem $H\Psi_n = E_n\Psi_n$. Die Eigenzustände sind Oszillatorwellenfunktionen $\Psi_n(x-\alpha)$ mit den Eigenenergien

$$E_n(\alpha) = \hbar\omega_1(n+\frac{1}{2}) + \frac{k_2}{2}\alpha^2 \quad (5.23)$$

Entsprechend Gleichung (2.29) wählen wir als nullte Näherung der Wellenfunktion ϕ den n_0 -ten Zustand des Oszillators. Damit erhalten wir aus (2.47)

$$\begin{aligned} b_0^{(0)} &= \hbar\omega_1(n_0+\frac{1}{2}) + \frac{k_2}{2}\alpha^2 \\ b_2^{(0)} &= \frac{M}{2} \\ b_4^{(0)} &= 0 \end{aligned} \quad (5.24)$$

Um dieses Ergebnis zu erhalten, mußten wir die Matrixelemente $\langle\Psi_m|\frac{\partial}{\partial\alpha}|\Psi_n\rangle$ berechnen. Mit den entsprechenden Beziehungen für die Hermiteschen Polynome erhält man

$$\langle\Psi_m|\frac{\partial}{\partial\alpha}|\Psi_n\rangle = -\sqrt{\frac{M\omega_1}{\hbar}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right) \quad (5.25)$$

Setzt man nun (5.24) in Gleichung (2.29) ein, dann erhält man die erste Näherung für die Beschleunigung

$$\begin{aligned} a_0^{(1)} &= \frac{k_2}{M} \alpha = \omega_2^2 \alpha \\ a_2^{(1)} &= a_4^{(1)} = 0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

Aus (2.44) erhält man dann die erste Näherung der Energie

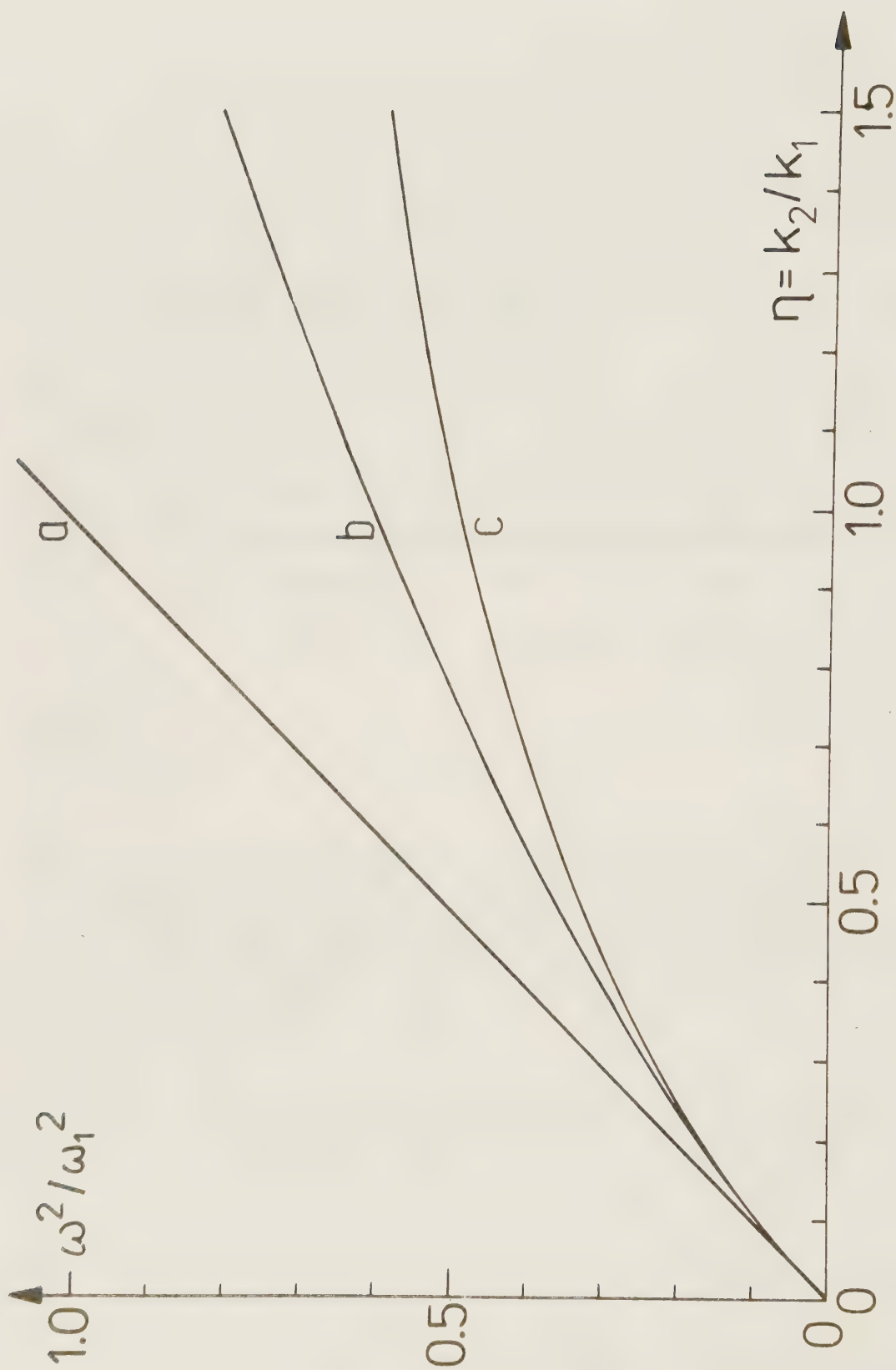


Fig. 3 Die Frequenzen der kollektiven Oszillation, die sich mit den verschiedenen Lösungsmethoden ergeben. Kurve a: adiabatisches Cranking-Modell; Kurve b: nichtadiabatische Störungsrechnung; Kurve c: exakte Lösung.

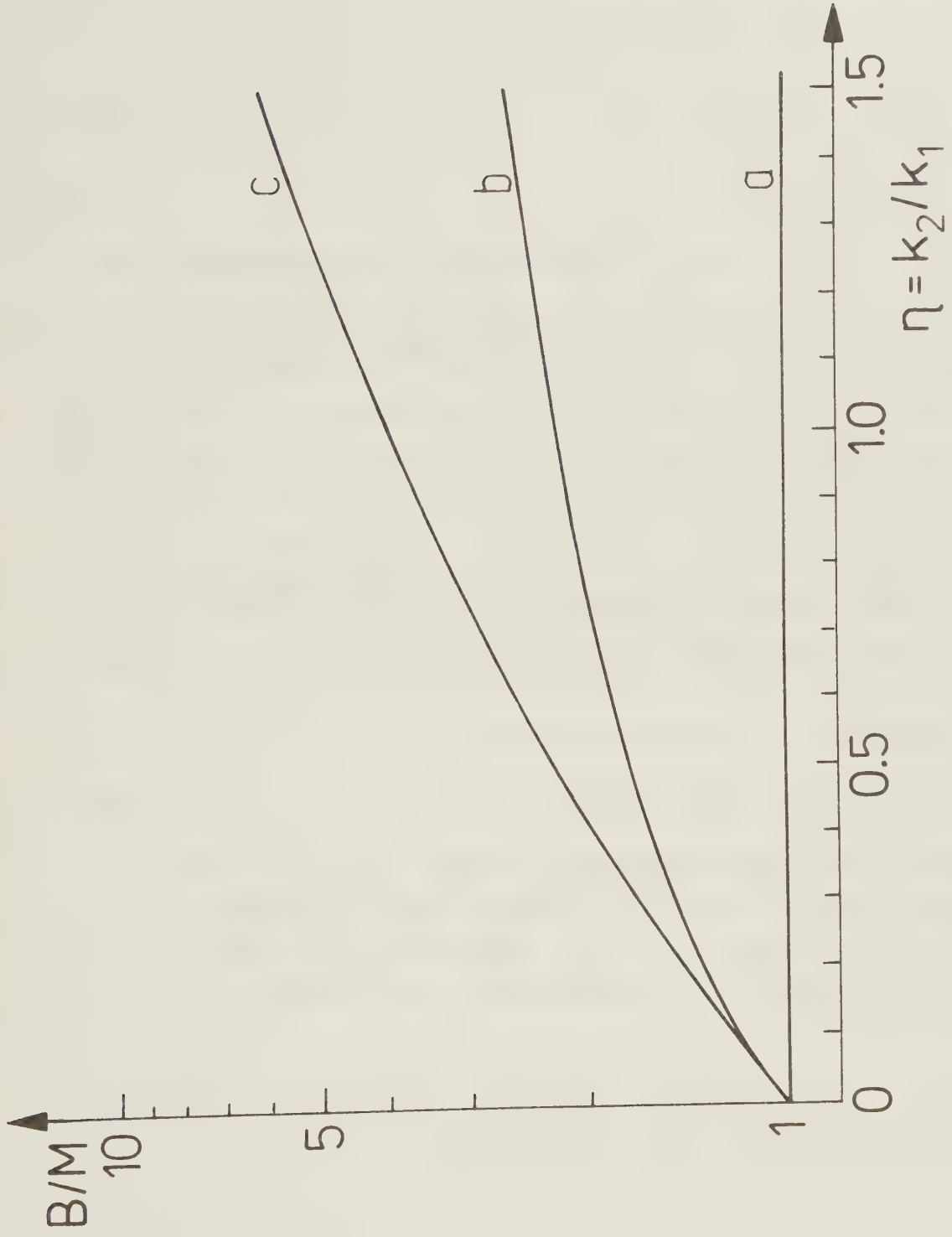


Fig. 4 Vergleich der Massenparameter, die sich aus den verschiedenen Lösungsmethoden ergeben, in Abhängigkeit von der Adiabatie η . Kurven a, b und c wie in Figur 3.

als

$$\begin{aligned} b_0^{(1)} &= \bar{n}\omega_1(n_0 + \frac{1}{2}) + \frac{k_2}{2}(1+\eta) \dot{\alpha}^2 \\ b_2^{(1)} &= \frac{M}{2} (1+2\eta) \\ b_4^{(1)} &= 0 \end{aligned} \quad (5.27)$$

Da $b_4^{(1)} = 0$ ist und $b_2^{(1)}$ nicht von α abhängt, folgt, daß alle a_2 , a_4 und b_4 Null sind. Für höhere Ordnungen der Iteration können wir eine einfache Rekursionsrelation herleiten

$$\frac{M}{\alpha} a_0^{(j+1)} = \frac{k_1 k_2 + (\frac{M}{\alpha} a_0^{(j)})^2}{k_1 + 2(\frac{M}{\alpha} a_0^{(j)})} \quad (5.28)$$

Wenn diese Iteration konvergiert, ist ihr Grenzwert

$$a_0 = \frac{k_1}{2} (\sqrt{1+4\eta} - 1) \frac{\alpha}{M} = \omega_2^2 (1-\eta+2\eta^2-\dots) \alpha \quad (5.29)$$

Die Frequenz der Kollektivbewegung in α

$$\omega_{it}^2 = a_0 / \alpha = \omega_2^2 (1-\eta+2\eta^2-\dots) \quad (5.30)$$

die man durch diese Iteration erhält, stimmt mit der exakten Frequenz aus (5.6) bis zur ersten Ordnung in η überein. In Fig. 3 wird die Frequenz ω_{it} mit der exakten Frequenz ω in Abhängigkeit der Adiabasie η verglichen.

Mit dem Ergebnis (5.29) ergibt sich die Energie im nichtadiabatischen Crankingmodell zu

$$E = b_0 + b_2 \dot{\alpha}^2 \quad (5.31)$$

wobei sich b_0 und b_2 entsprechend (2.44) ergeben

$$\begin{aligned} b_0 &= \hbar \omega_1 \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_2}{2} \left\{ 2 + \frac{1}{2\eta} (1 - \sqrt{1+4\eta}) \right\} \alpha^2 \\ &= \hbar \omega \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_2}{2} (1 + \eta - 2\eta^2 + \dots) \alpha^2 \end{aligned} \quad (5.32)$$

und

$$b_2 = \frac{M}{2} \sqrt{1+4\eta} = \frac{M}{2} (1 + 2\eta - 2\eta^2 + \dots) \quad (5.33)$$

Vergleichen wir den Massenparameter $M_{it}=2b_2$ mit dem exakten Wert $\tilde{M}=M(1+\eta)^2$, so erkennen wir, daß das Ergebnis der Störungsrechnung bis zu Termen ersten Ordnung in η richtig ist. Beide Massenparameter sind in Fig. 4 gezeichnet. Das adiabatische Cranking-Modell, das ja der nullten Näherung der obigen Iteration entspricht, liefert den Massenparameter $M_{cr}=M$, entsprechend (5.24). Aus diesem Grunde liefert das gewöhnliche adiabatische Cranking-Modell nur für $\eta \ll 1$ brauchbare Massenparameter.

5. 5. Überlegungen zur Wahl anderer Kollektivkoordinaten

Untersuchungen bezüglich einer anderen Wahl der Kollektivkoordinate α wurden von Liran¹⁹ angestellt. Er wählte statt der oben verwendeten Koordinate die Schwerpunktskoordinate des Systems als Kollektivkoordinate. Zusätzlich führte er eine Selbstkonsistenz-Bedingung ein: Entsprechend (1.5) kann $\alpha(t)$ als zeitlicher Erwartungswert von $\alpha(x,p)$ betrachtet werden. Das bedeutet, daß der Erwartungswert des Operators

$$F(x,p,\alpha(t)) = \alpha(t) - \alpha(x,p) \quad (5.34)$$

Null sein muß. Da, wie bei (1.2) erwähnt, bei der Wahl von $H(x,p, (t))$ eine gewisse Willkürlichkeit herrscht, kann man als Hamiltonoperator auch

$$\begin{aligned} H(x,p) &= H(x,p,\alpha(t),\lambda(t)) = \\ &= H(x,p,\alpha(t)) + \lambda(t) \cdot F(x,p,\alpha(t)) \end{aligned} \quad (5.35)$$

verwenden, wobei $\lambda(t)$ einen Lagrange-Multiplikator darstellt, der aus der Selbstkonsistenz-Bedingung bestimmt wird.

Mit der in Abschnitt 5.3. dargestellten Methode ergibt sich unter obigen Annahmen eine exakte Übereinstimmung mit dem adiabatischen Cranking-Modell. Dies ist allerdings nicht verwunderlich, denn bei nur einem vorhandenen Teilchen stimmt die Schwerpunktskoordinate mit der Einteilchenkoordinate überein. Allerdings stimmt sie nicht mit der Koordinate α überein, die in dem Beispiel verwendet wurde. Somit sieht man, daß die Ergebnisse von der speziellen Wahl der jeweiligen Kollektivkoordinate abhängen können.

Besonderes Gewicht kommt der sorgfältigen Wahl einer geeigneten Kollektivkoordinate durch die weiteren Untersuchungen von Liran zu, in denen er Dipol-Riesenresonanzen

untersucht. Dabei bewegen sich Protonen und Neutronen jeweils in getrennten harmonischen Potentialen, deren Minima gegeneinander ebenfalls harmonisch schwingen. Auch hier erhält Liran bei der exakten Lösung die gleichen Ergebnisse wie mit dem adiabatischen Cranking-Modell. Somit wird die Vermutung aufgeworfen, daß die Effekte die durch die Berücksichtigung der Nichtadiabasie und Energieerhaltung (2.6) durch die oben beschriebene explizite Berücksichtigung der Selbstkonsistenz gerade aufgehoben werden. Jedoch kann diese Frage wohl nicht abschließend beantwortet werden, solange bei diesen Untersuchungen nur die Schwerpunktkoordinate als Kollektivkoordinate verwendet wird, denn es ist auch denkbar, daß es bei einer Reihe von Problemen spezielle Kollektivkoordinaten - z.B. die Schwerpunktkoordinate - gibt und daß das adiabatische Cranking-Modell exakt gilt, wenn man das Kollektivsystem in diesen Koordinaten beschreibt. Eine solche Koordinate β könnte z. B. wegen der in (1.2) vorliegenden Willkürlichkeit durch

$$H(x,p,\beta(t)) = H(x,p,\alpha(t),\lambda(t)) \quad (5.36)$$

definiert werden, ohne daß damit gesagt ist, daß die Beschreibung des Systems durch dieses spezielle β physikalisch sinnvoll ist.

6. Praktische Rechnungen

6. 1. Art der Untersuchungen

Im folgenden sollen mit der oben hergeleiteten Methode praktische Fälle untersucht werden. Mit der normalen Cranking-Formel wurden von Maruhn²¹ ausführliche Untersuchungen für ^{236}U sowie für ^{226}Ra und ^{258}Fm durchgeführt. Ebenfalls unter Berücksichtigung höherer Terme der Störungsrechnung arbeitete Harris¹³. Ähnlich wie die vorliegende Arbeit berücksichtigte er Terme bis zur vierten Ordnung. Auch berechnete er bereits den normalen Cranking-Anteil des Massenparameters im Quasiteilchenformalismus, nicht jedoch die höheren Anteile. Auch wurde durch seinen einfachen Ansatz nur der Anteil des Störoperators nach (2.5) berücksichtigt. Andere realistische Rechnungen wurden von Wilets et al³⁶ für die Massenparameter von Quadrupoldeformationen durchgeführt. Chaffin und Dickmann⁸ rechneten für ^{236}U im Zweizentrenschalenmodell Bewegungen mit einem Freiheitsgrad, nämlich die Relativbewegung der beiden Zentren. Ähnlich wie in der vorliegenden Arbeit verwendeten sie dabei Störterme bis zur vierten Ordnung und vier-Quasiteilchen-Anregungen. Ihre Rechnungen, die mit den hier durchgeführten vergleichbar sind, werfen die Frage auf, inwieweit das adiabatische Cranking-Modell als Näherung bei Problemen dieser Art verwendet werden darf. Massen vierter Ordnung spielen bei dieser Bewegung schon bei Energien in der Größenordnung einiger Zehntel MeV eine beträchtliche Rolle. Die Autoren bezweifeln daher, daß in der Dynamik der Kernspaltung die Kollektivgeschwindigkeit $\dot{\alpha}$ ein geeigneter Entwicklungsparameter der Störungsrechnung ist (vergleiche dazu Kapitel 6.4.5.).

Auf der Basis der Arbeit von Maruhn sollen im folgenden die Auswirkungen der Korrekturen zum Cranking-Modell untersucht werden. Deshalb seien im folgenden die wesentlichen Überlegungen dazu kurz dargelegt.

Die Grundlage für die Berechnungen Maruhns bilden das Zweizentren-Schalenmodell^{20,22} sowie die Schalenkorrekturmethode nach Strutinsky^{31,32}. Die Matrixelemente im Cranking-Modell werden dann berechnet⁴, indem man für die Korrektur der Gesamtenergie durch die Paarkraft einen BCS-Ansatz macht³. Untersucht werden von Maruhn zwei Kollektivkoordinaten, nämlich die Massenasymetrie ξ zwischen den beiden Zentren sowie die Länge des Kernes λ . Zunächst sollen kurz die Parameter beschrieben werden, die den Kern im Zweizentrenmodell beschreiben (siehe Fig. 5).

Der Kern besteht aus zwei Nilsson-Elipsoiden mit gemeinsamer Symetrieachse. Ein Zusatzpotential schneidet die Potentialspitze an der Schnittstelle der beiden Elipsoide ab. Die Parameter, die die Kernform bestimmen, sind:

1. die Elongation λ , die die Länge des Kernes angibt
2. ϵ , ein Parameter für die Dicke des Halses zwischen den Fragmenten
3. $\beta_1 = a_1/b_1$
4. $\beta_2 = a_2/b_2$ } Deformation der Fragmente
5. die Massenasymetrie $\xi = (A_1 - A_2)/(A_1 + A_2)$

Bei der Massenasymetrie wurde als Fragmentmasse die Masse des Elipsoids genommen, welches das jeweilige Fragment zu einem vollen Elipsoid ergänzt. Ein Zusatzpotential zwischen den beiden Zentren der Fragmente, das aus Termen dritter und vierter Ordnung in z besteht, ist so gewählt, daß die Verbindung der Fragmente stetig differenzierbar ist (siehe Fig. 5). Um alle benötigten Größen aus diesen fünf Parametern berechnen zu können, sind noch zwei weitere Annahmen nötig, nämlich die Erhaltung des Volumens des Kernes und die Festlegung einer Äquipotentialfläche als Kernoberfläche.

Den folgenden Berechnungen wurden die gleichen Annahmen zugrunde gelegt wie in der oben zitierten Arbeit von Ma-

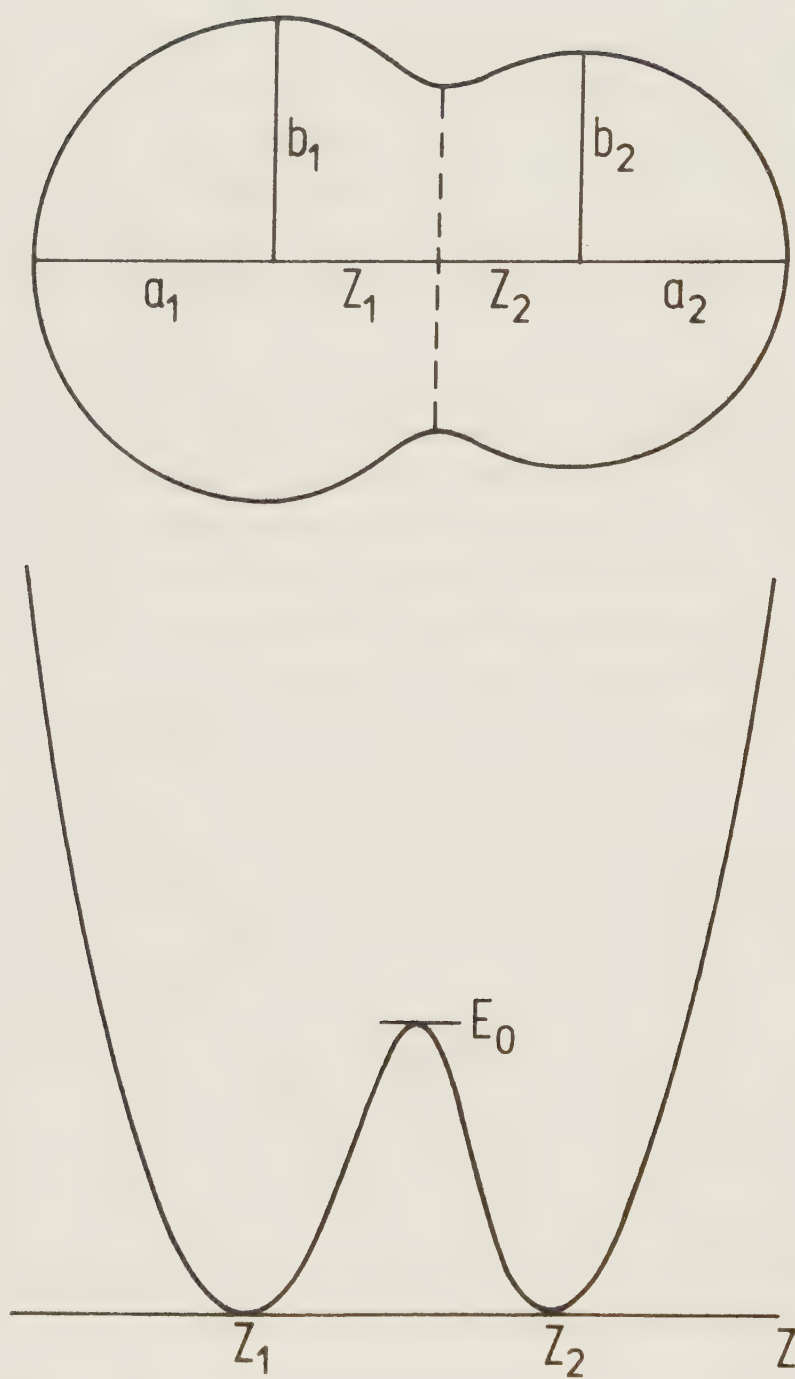


Fig. 5 Kernform und Potential im
Zweizentrenschalenmodell

ruhn. Insbesondere muß auf folgende Näherung hingewiesen werden: Rechnet man, wie weiter unten noch beschrieben wird, im Quasiteilchenformalismus, dann wirkt der Störoperator sowohl auf die Wellenfunktion als auch auf die Quasiteilchenbesetzungszahlen und der Massenparameter lautet

$$B_{\alpha_i \alpha_j} = 2\pi^2 \sum_{\nu, \mu} \frac{\langle \nu | \partial / \partial \alpha_i | \mu \rangle \langle \mu | \partial / \partial \alpha_j | \nu \rangle}{\tilde{\epsilon}_\mu + \tilde{\epsilon}_\nu} (u_\nu v_\mu + v_\nu u_\mu)^2 + \pi^2 \sum_{\nu} \frac{1}{v_\nu^2 \tilde{\epsilon}_\nu} \frac{\partial u_\nu}{\partial \alpha_i} \frac{\partial u_\nu}{\partial \alpha_j} \quad (6.1)$$

Während bei Rotationsbewegungen die Besetzungszahlen nicht von der Kollektivkoordinate abhängen, liefert dieser Teil bei Vibrationen und ähnlichen Bewegungen den mit Abstand stärkeren Beitrag. Entsprechend wie bei Maruhn konnte hier also dieser Teil alleine als gute Näherung benutzt werden. In obiger Gleichung (6.1) bedeuten ν und μ Quasiteilchenzustände, u und v sind die entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten und $\tilde{\epsilon}$ ist die Quasiteilchenenergie²¹. Auch die von Maruhn entwickelten Computer-Programme wurden verwendet, um die für die Cranking-Rechnung benötigten Matrixelemente zu erhalten. Dabei stellten sich folgende Schwierigkeiten ein:

Beim herkömmlichen Cranking-Modell werden für einen gegebenen Satz von Parametern - d.h. für einen Punkt der Potential-Energie-Fläche - die Cranking-Matrixelemente und aus diesen dann die Cranking-Massen berechnet. Bei dem erweiterten Cranking-Modell dagegen treten auch die Ableitungen dieser Matrixelemente auf, die durch numerische Differentiation gebildet werden. Dabei muß sorgfältig darauf geachtet werden, daß alle zur Berechnung der Ableitung herangezogenen Matrixelemente zum gleichen Niveau gehören. Die Computerprogramme von Maruhn wurden dement-

sprechend erweitert. Ernstere Schwierigkeiten ergaben sich aus numerischen Ungenauigkeiten beim Bilden der Ableitungen, die durch teilweise starke Abhängigkeit der Matrixelemente bezüglich kleiner Änderungen der gewählten Parameter auftreten. Hier half nur das sehr sorgfältige Auswählen der Parameter und die Berechnung genügend vieler Punkte für die numerische Differentiation. Beides ging zu Lasten einer starken Erhöhung der benötigten Rechenzeit. Diese erwies sich bereits bei Maruhn als beschränkender Faktor. Deshalb wurden von ihm zunächst die weniger interessanten Parameter ϵ , β_1 und β_2 eliminiert, indem für gegebene Werte von ξ und λ das Potential in den drei Parametern minimiert wurde. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich durch die Annahme, daß die ξ -Vibrationen im Vergleich zur λ -Bewegung sehr schnell sind. Somit wird die kollektive Bewegung des Kernes schließlich beschrieben durch die Schrödinger-Gleichung²¹

$$\left\{ - \frac{\hbar^2}{2\sqrt{B_{\xi\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{1}{2\sqrt{B_{\xi\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi} + V(\xi, \lambda) \right\} \cdot \phi(\xi) = E(\xi) \cdot \phi(\xi) \quad (6.2a)$$

mit der klassischen Gesamtenergie

$$H_0(\xi, \lambda) = \frac{1}{2} B_{\xi\xi}(\xi) \cdot \dot{\xi}^2 + V(\xi, \lambda) \quad (6.2b)$$

Wie bereits erwähnt, mußten bei den im folgenden durchgeführten Untersuchungen mehr Punkte berechnet werden als bei den Untersuchungen Maruhns, um eine ausreichende Genauigkeit für die numerische Differentiation zu erhalten. Auch mußte beim Minimieren des Potentials bezüglich der Parameter ϵ , β_1 und β_2 aus dem gleichen Grund mehr Sorgfalt aufgewendet werden. Um die Rechenzeit in erträglichen Gren-

zen zu halten, wurden hier nur die Korrekturen des erweiterten Cranking-Modells auf die ξ -Massen untersucht. Nicht untersucht wurde daher auch im folgenden die Wahl eines geeigneten Startpunktes für die Integration des Differentialgleichungssystems (2.43 - 2.45) in λ -Richtung. Schwierigkeiten durch mangelnde numerische Genauigkeit und großen Speicherbedarf im Rechner sowie zusätzliche Konvergenzprobleme würden anftreten, wenn man die Kopplungsmassen zwischen der ξ - und λ -Bewegung, $B_{\xi\lambda}$, mit der neuen Methode gemäß Kapitel 2.1.3. berechnen will. Hierzu müßte die numerische Genauigkeit der Computer-Programme, mit denen die Matrixelemente berechnet werden, deutlich verbessert werden.

Für die Massenparameter höherer Ordnung - zu höheren Potenzen der kollektiven Geschwindigkeit - wurden Abschätzungen gemacht.

6. 2. Matrixelemente für vier Quasiteilchen

Die Matrixelemente, die im Cranking-Modell auftreten, haben die Form (siehe Anhang C)

$$\langle n_0 n \rangle \langle n n_0 \rangle ; \quad \langle n_0 n \rangle \langle n l \rangle \langle l n_0 \rangle ; \quad \langle n_0 n \rangle \langle n l \rangle \langle l k \rangle \langle k n_0 \rangle$$

wobei die Abkürzung

$$\langle mn \rangle = \langle \psi_m | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \psi_n \rangle \quad (6.3)$$

verwendet wurde. Rechnet man wie üblich²¹ mit dem BCS-Ansatz für die Kernwellenfunktion mit Paarkraft, dann entspricht die Wellenfunktion des Grundzustandes n_0 des untersuchten Kernes in der üblichen Darstellung der zweiten Quantisierung dem BCS-Grundzustand

$$|BCS\rangle = \prod_{v>0} (u_v + v_v a_v^\dagger a_{\tilde{v}}) |0_{vac}\rangle \quad (6.4)$$

Hierbei sind u und v die BCS-Besetzungszahlen und $|0_{vac}\rangle$ der Vacuumzustand.

Untersucht man nun die Wirkung des Operators $\partial/\partial\alpha$ auf den BCS-Grundzustand, dann stellt man fest, daß es zwei Anteile gibt, denn der Operator wirkt sowohl auf die Besetzungszahlen als auch auf die Wellenfunktion selbst. Untersuchungen von Maruhn²¹ haben gezeigt, daß der erste Anteil bei Rotationen verschwindet, während er bei Vibrationen und ähnlichen Bewegungen bei weitem dominiert. Für die später untersuchten Bewegungen ist daher nur dieser Anteil von Interesse.

Differenzieren wir in dem Produkt in (6.4) die Besetzungszahlen, so erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |BCS\rangle = \sum_{\mu>0} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial \alpha} + \frac{\partial v_\mu}{\partial \alpha} a_\mu^\dagger a_{-\mu}^\dagger \right) \prod_{\substack{v>0 \\ v \neq \mu}} (u_v + v_v a_v^\dagger a_{\tilde{v}}) |0_{vac}\rangle \quad (6.5)$$

Wegen

$$u^2 + v^2 = 1 \quad (6.6)$$

erhält man

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |BCS\rangle = \sum_{\mu > 0} \left(-\frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \right) \prod_{\substack{\nu > 0 \\ \nu \neq \mu}} (u_{\nu} + v_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{-\nu}^{\dagger}) (u_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{-\mu}^{\dagger} - v_{\mu}) |0_{Vac}\rangle \quad (6.7)$$

und entsprechen⁴ durch Transformation auf Quasiteilchenoperatoren

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |BCS\rangle = \sum_{\mu > 0} \left(-\frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \right) \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{-\mu}^{\dagger} |BCS\rangle = \sum_{\mu > 0} \left(-\frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \right) |\mu - \mu\rangle \quad (6.8)$$

Der Operator $\partial/\partial\alpha$ bewirkt also aus dem BCS-Grundzustand nur Anregungen mit zwei Quasiteilchen. Die Matrixelemente lauten damit endgültig

$$\langle \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} |BCS\rangle = - \frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \delta_{\nu - \mu} \quad (6.9)$$

Damit lassen sich die oben angegebenen Kombinationen aus zwei Matrixelementen berechnen, nicht jedoch diejenigen aus drei und vier Elementen. Um auch diese zu erhalten, muß man die Wirkung des Operators $\partial/\partial\alpha$ auf Zwei-Quasiteilchenzustände untersuchen. Dabei brauchen nur Zustände der Form $|\mu - \mu\rangle$ untersucht werden, denn andere werden gemäß (6.9) nicht aus dem BCS-Grundzustand erzeugt. Den zu untersuchenden Zwei-Quasiteilchen-Zustand stellt man am besten durch den BCS-Grundzustand und die entsprechenden Erzeugungsoperatoren dar

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |\kappa \lambda\rangle = \frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} |BCS\rangle \quad (6.10)$$

Unter Berücksichtigung von

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha_{\nu}^{\dagger} = \frac{1}{v_{\nu}} \frac{\partial u_{\nu}}{\partial \alpha} \alpha_{-\nu} \quad (6.11)$$

erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} |\kappa \lambda \rangle = & \left(\frac{1}{v_{\kappa}} \frac{\partial u_{\kappa}}{\partial \alpha} \alpha_{-\kappa} \right) \alpha_{\lambda}^{\dagger} |BCS\rangle + \alpha_{\kappa}^{\dagger} \left(\frac{1}{v_{\lambda}} \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial \alpha} \alpha_{-\lambda} \right) |BCS\rangle \\ & + \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} \sum_{\nu > 0} \left(-\frac{1}{v_{\nu}} \frac{\partial u_{\nu}}{\partial \alpha} \right) \alpha_{\nu}^{\dagger} \alpha_{-\nu}^{\dagger} |BCS\rangle \end{aligned} \quad (6.12)$$

Berücksichtigt man noch, daß die Wirkung eines Quasiteilchenvernichtungsoperators auf den BCS-Grundzustand Null ergibt, dann lautet das endgültige Ergebnis

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |\kappa \lambda \rangle = \frac{1}{v_{\kappa}} \frac{\partial u_{\kappa}}{\partial \alpha} \delta_{\kappa-\lambda} |BCS\rangle - \sum_{\mu > 0} \frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\nu}^{\dagger} \delta_{\nu-\mu} |BCS\rangle \quad (6.13)$$

Wie man sieht, entsteht sowohl ein Vier-Quasiteilchen-Zustand als auch der BCS-Grundzustand, das Quasiteilchenvakuum. Aus letzterem folgt sofort

$$\langle BCS | \frac{\partial}{\partial \alpha} |\kappa \lambda \rangle = \frac{1}{v_{\kappa}} \frac{\partial u_{\kappa}}{\partial \alpha} \delta_{\kappa-\lambda} \quad (6.14)$$

was wegen (6.9) und

$$\langle m | \frac{\partial}{\partial \alpha} | n \rangle = -\langle n | \frac{\partial}{\partial \alpha} | m \rangle^* \quad (6.15)$$

auch zu erwarten war.

Nicht so trivial ist die Behandlung des Vier-Quasiteilchen-Zustandes. Dessen Überlapp mit einem anderen Vierer-Zustand läßt sich folgendermaßen schreiben

$$\langle \alpha \beta \gamma \delta | \kappa \lambda \mu \nu \rangle = - \sum_{\mu > 0} \frac{1}{v_{\mu}} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial \alpha} \langle BCS | \alpha_{\alpha} \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \alpha_{\delta} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\nu}^{\dagger} | BCS \rangle \cdot \delta_{\nu-\mu} \quad (6.16)$$

Dieser Ausdruck ist mit Hilfe des Wick'schen Theorems als Normalprodukt zu schreiben, d.h. auf eine Form zu

bringen, in der sich Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren ablösen. Dabei sind alle möglichen Kombinationen zu berücksichtigen. Diese recht umständliche Rechnung ist in Anhang D durchgeführt und liefert ein leicht einsehendes Ergebnis: Zu den bereits vorhandenen zwei Quasiteilchen werden zwei weitere erzeugt. Das Matrixelement ist das gleiche wie jenes, das den Übergang vom Quasiteilchenvakuum zu dem neugeschaffenen Quasiteilchen darstellt.

In der folgenden Übersicht sind noch einmal alle auftretenden Matrixelemente zusammengefaßt:

$$\begin{aligned}
 \langle \text{BCS} | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \text{BCS} \rangle &= 0 \\
 \langle \text{BCS} | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \mu \nu \rangle &= \frac{1}{v_\mu} \frac{\partial u_\mu}{\partial \alpha} \delta_{\mu-\nu} \\
 \langle \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \text{BCS} \rangle &= - \frac{1}{v_\mu} \frac{\partial u_\mu}{\partial \alpha} \delta_{\mu-\nu} \\
 \langle \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \mu' \nu' \rangle &= 0 \\
 \langle \text{BCS} | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \kappa \lambda \mu \nu \rangle &= 0 \quad (6.17) \\
 \langle \kappa \lambda \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \text{BCS} \rangle &= 0 \\
 \langle \kappa \lambda | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \kappa' \lambda' \mu \nu \rangle &= \frac{1}{v_\mu} \frac{\partial u_\mu}{\partial \alpha} \delta_{\mu-\nu} \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{\lambda \lambda'} (1 - \delta_{\kappa \mu}) \\
 \langle \kappa \lambda \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \kappa' \lambda' \rangle &= - \frac{1}{v_\mu} \frac{\partial u_\mu}{\partial \alpha} \delta_{\mu-\nu} \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{\lambda \lambda'} (1 - \delta_{\kappa \mu}) \\
 \langle \kappa \lambda \mu \nu | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \kappa' \lambda' \mu' \nu' \rangle &= 0
 \end{aligned}$$

Die Nullen erklären sich daher, daß der Operator $\partial/\partial\alpha$ zwei-Quasiteilchen-Anregungen erzeugt, so daß der Zustand der rechten Seite zwei Quasiteilchen zusätzlich enthält. Ein Überlapp ist aber nur vorhanden, wenn die Zustände gleiche Zahlen von Quasiteilchen enthalten.

Daraus ergibt sich auch, daß von den eingangs angegebenen Kombinationen von Matrixelementen nur solche mit einer geraden Anzahl von Elementen von Null verschieden sind. Bei einer Kombination von drei Matrixelementen zum Beispiel sind die beiden äußeren Übergänge vom BCS-Grundzustand auf Zwei-Quasiteilchenzustände, das mittlere Element muß somit den Übergang zwischen zwei Zwei-Quasiteilchen-Zuständen beschreiben und ist somit Null.

6. 3. Integration der gekoppelten Differentialgleichungen

In Kapitel 2.3. wurde in den Gleichungen (2.43), (2.44) und (2.45) ein System gekoppelter Differentialgleichungen dargestellt, die sich aus der Durchführung der Störungsrechnung in Abschnitt 2.2. herleiteten. Die Lösung dieses Differentialgleichungssystems liefert unmittelbar die gesuchten Massenparameter, ein modifiziertes Potential sowie auch die Beschleunigung der Kollektivbewegung. Da bei den hier vorgenommenen Untersuchungen der ξ -Massen die auftretenden Matrixelemente stark schwanken, eignet sich zur Lösung der Differentialgleichungen im vorliegenden Fall die weiter oben beschriebene Iterationsmethode mit numerischer Differentiation nicht. Insbesondere kann man durch die Zusatzbedingung, daß die ξ -Massen symmetrisch zur Achse $\xi=0$ sind, für diesen Punkt die exakte Lösung analytisch angeben. Dieser Punkt eignet sich daher als Startpunkt einer numerischen Integration. Die physikalische Bedeutung der Symmetrie und des Startpunktes der Integration werden im Abschnitt 6.4.4. näher untersucht.

Für das Potential b_0 folgt aus (2.43) - (2.45)

$$b_0 = E_0 + b_0'^2 \frac{k_{11}}{2b_2^2} ; \quad k_{11} \text{ siehe (6.22)} \quad (6.18)$$

bzw.

$$b_0' = \pm 2b_2 \sqrt{(b_0 - E_0)/k_{11}} \quad (6.19)$$

Aus der Symmetrie in Bezug auf den Ursprung folgt $b_0'=0$ und somit

$$b_0(0) = E_0(0) \quad (6.20)$$

Aus den gleichen Formeln erhält man für die b_2 -Masse unter Vernachlässigung von b_4 (wofür die Begründung am Schluß dieses Kapitels gegeben wird)

$$b_2 = k_{21} + \frac{b_0'}{2b_2} k_{31} + \frac{b_0' b_2 - b_0' b_2'}{b_2^2} k_{32} + \frac{b_0' b_2'}{2b_2^2} k_{33} \quad (6.21)$$

mit

$$\begin{aligned}
 k_{11} &= \sum_{n=0} K_{21n}^2 \cdot \Delta_n \\
 k_{21} &= \sum_{n \neq 0} K_{11n}^2 \cdot \Delta_n \\
 k_{31} &= \sum_{n \neq 0} (K_{21n} K_{22n} + K_{11n} K_{31n}) \cdot \Delta_n \\
 k_{32} &= \sum_{n \neq 0} K_{11n} K_{32n} \cdot \Delta_n \\
 k_{33} &= \sum_{n \neq 0} (K_{21n}^2 - 2K_{11n} K_{32n}) \cdot \Delta_n
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

Die in (2.45) auftretende Ableitung von a_0 wurde aus (2.45) analytisch abgeleitet.

Im Punkt $\xi=0$ gilt wegen der Symetrie

$$b_0' = b_2' = 0 \tag{6.23}$$

und man erhält

$$b_2^2 - b_2 k_{21} - b_0'' k_{32} = 0 \tag{6.24}$$

Um die zweite Ableitung von b_0 im Ursprung zu bestimmen, setzen wir sowohl E_0 als auch b_0 als Potenzreihe in ξ an

$$b_0 = c\xi^2 + d\xi^4 + \dots \tag{6.25}$$

$$E_0 = e\xi^2 + f\xi^4 + \dots$$

Einsetzen in (6.18) ergibt durch Koeffizientenvergleich für die zweite Potenz von ξ

$$c = e + c^2 k_{11} / b_2^2 \tag{6.26}$$

bzw.

$$c = \frac{b_2^2}{2k_{11}} \{1 \pm \sqrt{1 - 4ek_{11}/b_2^2}\} \tag{6.27}$$

Damit hat man

$$b_0'' = 2c = \frac{b_2^2}{k_{11}} \{1 \pm \sqrt{1 - 4ek_{11}/b_2^2}\} \tag{6.28}$$

Dies kann man in (6.24) einsetzen. Aus (6.22) kann man durch einen Vergleich mit Anhang C ersehen, daß

$$k_{32} = k_{11} = \hbar^4 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n_0 n \rangle \langle n n_0 \rangle}{\Delta_n^3} \quad (6.29)$$

gilt. Damit erhält man schließlich

$$b_2^2 = K_{21}^2 + 4k_{11}e \quad (6.30)$$

Erwähnt sei noch, daß die Doppeldeutigkeit des Wurzelvorzeichens in (6.28) bei der obigen Rechnung fortfällt, da bei der Auflösung der Gleichung nach b_2^2 quadriert werden muß, um die Wurzel zu beseitigen.

Aus der Gleichung (6.21) erhält man durch Multiplizieren mit b_2^2 und Ordnen nach Potenzen von b_2

$$b_2^3 - b_2^2 K_{21} - b_2 (b_0' k_{31} + b_0' k_{32}) - b_2' b_0' \left(\frac{k_{33}}{2} - k_{32} \right) = 0 \quad (6.31)$$

Hier kann man b_2' entsprechend einer n-Punkte-Formel für numerische Differentiation durch das zu berechnende b_2 im gerade untersuchten Punkt sowie durch bereits bekannte und somit feste Werte von b_2 in vorhergehenden Punkten ausdrücken. Aus der so entstandenen endgültigen Gleichung dritten Grades kann b_2 analytisch berechnet werden. Natürlich ist es auch möglich, (6.31) nach b_2' aufzulösen und den Wert der Ableitung mit bekannten Werten von b_2 zu berechnen. Dabei geht jedoch wegen des Auftretens von b_2 in der dritten Potenz ein Fehler der bekannten b_2 -Werte sehr stark ein, so daß sich die oben beschriebene Methode besser eignet.

Im Gegensatz zu b_2' gibt (6.19) die Ableitung des Potentials b_0 exakt an. Hier kann deshalb sofort mit einer n-Punkte-Formel integriert werden. Lediglich der erste vom Ursprung verschiedene Punkt verdient etwas Aufmerksamkeit: Da im Ursprung $b_0'(0) = 0$ ist, muß man zu seiner Berechnung die zweite Ableitung im Ursprung heranziehen.

Ein ähnlicher Ansatz, wie er am Anfang des Kapitels für die b_2 -Masse gemacht wurde, liefert für die b_4 -Masse

$$b_4 = k_{41} + 2a_2 k_{31} + 2a_2' k_{32} + (a_2^2 + 2a_0 a_4) k_{42} \quad (6.32)$$

mit

$$\begin{aligned} k_{41} &= b_{4cr} = \sum_{n \neq 0} (K_{22}^2 + 2K_{11n} K_{33n}) \Delta_n - \left(\sum_{n \neq 0} K_{11n}^2 \Delta_n \right) \cdot \left(\sum_{n \neq 0} K_{11n}^2 \right) \\ k_{42} &= \sum_{n \neq 0} (K_{21n}^2 - 4K_{11n} K_{32n}) \cdot \Delta_n \end{aligned} \quad (6.33)$$

k_{31} und k_{32} wie in (6.22)

Setzt man a_0 , a_2 und a_4 aus (2.43) ein und berechnet - ebenfalls aus (2.43) - a_2' zu

$$a_2' = \frac{b_2'}{2b_2} - \frac{b_2'^2 + b_0' b_4 + b_0' b_4'}{2b_2^2} + \frac{2b_0' b_2' b_4}{b_2^3} \quad (6.34)$$

so erhält man schließlich eine quadratische Gleichung für b_4 , die jedoch noch die Ableitung b_4' enthält

$$\begin{aligned} &b_4 \frac{b_0'^2}{b_2^2} k_{42} + b_4 \left\{ -1 - 2 \frac{b_0'}{b_2} k_{31} - 2 \frac{b_0'}{b_2} k_{32} + \frac{b_0' b_2'}{b_2^3} (4k_{32} - \frac{3}{2} k_{42}) \right\} \\ &- b_4' \frac{b_0'}{2b_2^2} (4k_{32} - k_{42}) + \left\{ k_{41} + \frac{b_2'}{b_2} (k_{31} + k_{32}) - \frac{b_2'^2}{4b_2^2} (4k_{32} - k_{42}) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (6.35)$$

Setzt man im Ursprung wieder

$$b_0' = b_2' = b_4' = 0 \quad (6.36)$$

so bleibt schließlich

$$-b_4(0) \cdot \left\{ 1 + 2 \frac{b_0'}{b_2} k_{32} \right\} + k_{41} = 0 \quad (6.37)$$

Wenn man noch berücksichtigt, daß k_{41} gerade die Masse vierter Ordnung ist, die man nach dem herkömmlichen Cranking-Modell erhält, so kann man schreiben

$$b_4(0) = b_{4cr} / \left(1 + 2 \frac{b_0'}{b_2} k_{32} \right) \quad (6.38)$$

Diese Gleichung gibt die adiabatische b_4 -Masse im Ursprung exakt an.

Zur Berechnung der b_4 -Masse an vom Ursprung verschiedenen Punkten kann man in (6.35) die Ableitung b_4' z.B. durch eine zwei-Punkte-Formel angenähert ausdrücken

$$b_4' = \{b_4(n) - b_4(n-1)\} / \Delta\xi \quad (6.39)$$

und erhält dann eine quadratische Gleichung für $b_4(n)$. Natürlich lassen sich auch andere, genauere, Integrationsverfahren wie die Prediktor-Korrektor-Methode anwenden.

Hierbei wurde nicht die Kopplung zwischen b_2 und b_4 berücksichtigt. Diese könnte man in die Rechnung einbeziehen, indem man in (6. 21) den dort vernachlässigten Term

$$- \frac{2b_0' b_4}{b_2^2} k_{33}$$

einbezieht, mit b_4 einen neuen Wert für b_2 berechnet und so iterativ die gekoppelten Gleichungen löst. Dieses Verfahren konvergierte bei den hier durchgeführten Rechnungen jedoch nicht. Deshalb wurde auf die exakte Behandlung der Kopplung verzichtet, was sicher auch zulässig ist, wie eine Abschätzung der Korrektur später zeigt (vergleiche Tab. 4).

Natürlich sind auch noch andere, genauere, dafür aber auch aufwendigere Verfahren anwendbar, von denen hier der Vollständigkeit halber noch ein weiteres skizziert werden soll. So könnte man beispielsweise, nachdem die Koeffizienten k_{ij} aus (6.22) zu einer Anzahl von Punkten berechnet sind, von der exakten Lösung bei $\xi=0$ als festem Wert ausgehen und die benachbarten Punkte über Differenzengleichungen ausdrücken. Über weitere Differenzengleichungen lassen sich dann die diesen Punkten benachbarten Punkte ausdrücken usw. Bei einem System linearer Differentialgleichungen erhält man dadurch ein lineares System algebraischer Gleichungen, dessen

Lösung sich über Determinanten sofort angeben läßt. Beim hier vorliegenden Problem ist die Lösung nicht so einfach möglich, da es sich nicht um ein lineares Differentialgleichungssystem handelt, jedoch wäre die Methode prinzipiell anwendbar.

Auch eine Lösung durch einen Potenzreihenansatz für b_0 , b_2 und b_4 ist sicher möglich. Hält man sich jedoch die Überlegungen vor Augen, die zur Genauigkeit der Rechnungen in Abschnitt 6.4.2. angestellt werden, so erscheint es fraglich, ob sich der damit verbundene Aufwand lohnt. Eine genauere analytische Untersuchung der Differentialgleichung für das Potential b_0 , (6.18), wird in Abschnitt 6.4.4. durchgeführt.

6. 4. Ergebnisse der Rechnungen

6. 4. 1. Allgemeines

Die Rechnungen wurden für den Kern ^{236}U bei λ -Werten zwischen 1,70fm und 1,85fm durchgeführt. Die Massenasymmetrie ξ wurde zwischen 0 und 0,4 variiert, wobei aber noch die unten durchgeführten Überlegungen zum Gültigkeitsbereich der Rechnungen zu beachten sind. Die unmittelbaren Ergebnisse für die Massenparameter sind in Tab. 1 wiedergegeben. Die Werte der Parameter ϵ , β_1 und β_2 , die den Rechnungen zugrundegelegt wurden und für die bei gegebenem λ und ξ jeweils das Potential minimal wird, sind in Tab. 2 wiedergegeben. In Tab. 3a - Tab. 3d schließlich sind - als Beispielrechnung für die spätere Auswertung - einige Zwischenergebnisse einer Rechnung für $\lambda = 1,80\text{fm}$ wiedergegeben, und zwar die Werte der Quasiteilchenbesetzungszahlen, der Matrixelemente $\langle n | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \text{BCS} \rangle$, der Energienenner zu den Matrixelementen, die Energieniveaus sowie die Endergebnisse. Dabei gibt eine Spalte jeweils die Werte zu steigenden Quantenzahlen wieder, während die verschiedenen Spalten verschiedene Werte für die Massenasymmetrie ξ bedeuten, wobei ξ nach rechts ansteigt.

Eine kurze Überlegung zu den Einheiten, in denen die auftretenden Größen gemessen werden, ist noch nötig. Die Massenasymmetrie ξ als Verhältnis zweier Massen ist eine dimensionslose Größe. Daraus resultiert, daß die kollektive Geschwindigkeit die Dimension einer inversen Zeit hat. Als Zeiteinheit wurde willkürlich $\tau = 10^{-22}\text{sec}$ gewählt, da dann die Protonenmasse in der Einheit

$$M_{\text{Prot}} = \frac{E_{\text{Prot}}}{c^2} = 1,043 \frac{\text{MeV}}{\text{fm}^2 \tau^2} \quad (6.40)$$

fast genau den Zahlenwert 1 hat. Gibt man nun die Gesamt-

energie in $\text{MeV}/M_{\text{prot}}$ an, dann wird der wichtige Massenparameter b_2 in der Einheit fm^2 gemessen und hängt somit nicht von der willkürlichen Wahl von τ ab, ohne daß sich der Zahlenwert der Energie maßgeblich ändert. Die Einheit des Potentials b_0 ist dann $\text{fm}^2\tau^2$, die von b_4 ist fm^2/τ^2 . Diese Werte hängen von der Wahl der Zeiteinheit τ ab, ebenso natürlich die Werte der kollektiven Geschwindigkeit $\dot{\xi}$. Dieser scheinbare Nachteil wird aber durch die oben genannte spezielle Wahl von τ ausgeglichen. Natürlich könnte man die verschiedenen Größen in jeder beliebigen Einheit angeben, jedoch ergeben sich so die handlichsten Zahlenwerte.

POTENTIAL UND MASSEN: (für $\lambda = 1,85$)

ALPHA	BNULL	ENULL	ITER, MASSE	CR, MASSE	ITER, B4	CR, B4
0,0000	2,3616+00	2,3616+00	1,2287+04	3,9263+03	-6,3670+07	-1,5033+08
5,0000-02	2,9574+00	2,7547+00	2,7095+04	1,8560+04	1,1905+08	5,9299+07
1,0000-01	5,0100+00	1,6145+00	2,6070+04	1,1009+04	7,8856+07	3,4967+08
1,5000-01	1,3587+01	0,0000	6,2719+04	1,1563+04	5,8694+07	3,0086+08
2,0000-01	5,4346+01	4,4411+01	1,0097+05	4,5372+04	1,1925+08	2,6279+08
2,5000-01	8,9611+01	3,3893+00	5,6803+04	5,2914+03	1,0046+08	8,7189+08
3,0000-01	2,5521+02	3,3486+00	1,8813+05	8,4977+03	6,1385+07	4,9526+08
3,5000-01	9,6924+02	4,0193+00	4,3677+05	2,7378+04	6,9671+07	8,6592+08
4,0000-01	2,2300+03	5,8960+00	3,9038+05	1,2992+04	1,0367+08	2,1021+09
4,5000-01	4,1651+03	6,4187+00	2,2499+06	1,3713+04	-3,1706+09	-1,1060+10
5,0000-01	2,7405+04	7,8542+00	1,2749+07	6,3512+04	0,0000	-9,3718+10

POTENTIAL UND MASSEN: (für $\lambda = 1,80$)

ALPHA	BNULL	ENULL	ITER, MASSE	CR, MASSE	ITER, B4	CR, B4
0,0000	2,8087+00	2,8087+00	2,6313+04	3,3860+03	-2,2656+08	-6,2142+09
5,0000-02	6,6456+00	4,9740+00	1,3864+04	5,7981+03	0,0000	1,0452+09
1,0000-01	1,0685+01	2,7498+00	8,1929+03	4,9613+02	2,0629+07	1,5243+08
1,5000-01	3,0317+01	7,1690+01	8,3232+04	5,7825+03	5,8059+07	3,0472+08
2,0000-01	1,3365+02	0,0000	1,5904+05	5,7239+04	6,7881+07	2,1001+09
2,5000-01	1,8549+02	3,4441+00	7,5939+04	1,2524+04	1,3822+08	4,6643+08
3,0000-01	3,3816+02	2,9067+00	1,3953+05	6,3639+03	5,9857+07	3,9762+08
3,5000-01	1,0773+03	3,7785+00	5,3365+05	2,1626+04	1,7233+08	1,3338+09
4,0000-01	3,2080+03	5,8005+00	6,5507+05	3,0852+04	1,0374+08	2,0794+09
4,5000-01	5,7394+03	6,2452+00	1,8987+06	3,2918+04	6,8724+08	8,2588+08
5,0000-01	1,5856+04	7,0788+00	4,6687+06	4,4414+04	0,0000	-2,1279+10

POTENTIAL UND MASSEN: (für $\lambda = 1,75$)

ALPHA	BNULL	ENULL	ITER, MASSE	CR, MASSE	ITER, B4	CR, B4
0,0000	3,5844+00	3,5844+00	1,8313+04	4,3001+03	-6,2669+06	-1,5858+08
5,0000-02	4,0141+00	4,3436+00	1,9821+04	4,2492+03	4,1400+07	2,1492+08
1,0000-01	9,2448+00	2,0155+00	1,5300+04	7,1914+03	4,1982+07	3,3708+08
1,5000-01	1,9558+01	1,7969+00	1,5977+04	1,3148+04	2,5819+07	1,5425+08
2,0000-01	2,3393+01	0,0000	1,3019+04	1,0680+04	1,6862+07	8,8022+08
2,5000-01	3,5140+01	2,3394+00	5,7889+03	1,7144+03	4,6479+06	7,8732+08
3,0000-01	4,9162+01	2,9242+00	2,2085+04	2,3018+03	3,5595+06	3,1567+08
3,5000-01	1,3025+02	3,4882+00	1,2250+05	1,0500+04	1,5917+07	1,1831+09
4,0000-01	4,0581+02	4,9251+00	1,2453+05	1,1030+04	4,1596+07	8,9295+08
4,5000-01	6,7950+02	5,9573+00	3,8820+05	1,3128+04	2,1362+08	2,1347+09
5,0000-01	2,0781+03	6,5601+00	3,6416+05	8,7662+03	9,5808+07	1,2067+09

POTENTIAL UND MASSEN: (für $\lambda = 1,70$)

ALPHA	BNULL	ENULL	ITER, MASSE	CR, MASSE	ITER, B4	CR, B4
0,0000	2,0871+00	2,0871+00	1,1978+04	1,4058+03	-3,0493+08	-8,4323+08
5,0000-02	3,8280+00	3,0597+00	1,4216+04	8,3038+03	1,7233+07	4,0275+08
1,0000-01	6,0642+00	2,3720+00	6,8090+03	1,5299+03	1,3455+07	6,3201+08
1,5000-01	1,3596+01	8,4165+01	7,2242+03	1,9028+02	4,5022+06	1,9823+08
2,0000-01	6,1037+01	0,0000	7,4590+03	5,3729+02	1,5405+06	4,6854+08
2,5000-01	8,5893+01	2,1484+00	1,2222+04	7,3897+02	2,2338+06	4,7529+08
3,0000-01	1,6849+02	1,9516+00	7,4889+04	2,6361+03	6,0184+06	4,5595+08
3,5000-01	5,8765+02	3,2560+00	2,2831+05	7,8489+03	2,7869+07	2,5312+09
4,0000-01	1,6860+03	4,2951+00	1,8898+05	4,9543+03	2,1719+07	3,7521+09
4,5000-01	2,9643+03	5,4685+00	1,0527+05	4,3958+02	1,2859+07	9,3148+08
5,0000-01	9,7832+03	7,4807+00	1,3455+06	3,5523+03	-3,6029+08	-1,3938+09

Tabelle 1: Massenparameter zweiter und vierter Ordnung nach dem gewöhnlichen und dem nichtadiabatischen Cranking-Modell sowie die Potentiale E_0 und b_0 in Abhängigkeit von ξ (hier mit ALPHA bezeichnet) für verschiedene Werte von λ .

ξ	$\lambda = 1,85$			$\lambda = 1,80$			$\lambda = 1,75$			$\lambda = 1,7$		
	ϵ	β_1	β_2	ϵ	β_1	β_2	ϵ	β_1	β_2	ϵ	β_1	β_2
0,00	0,08	1,01	1,01	0,08	1,06	1,00	0,09	1,00	1,10	0,07	0,95	0,95
0,05	0,20	0,93	1,05	0,27	0,95	1,26	0,11	0,95	1,16	0,23	0,96	1,22
0,10	0,31	0,90	1,10	0,42	0,92	1,34	0,14	0,92	1,05	0,36	0,97	1,40
0,15	0,39	0,94	1,19	0,45	0,97	1,32	0,40	0,97	1,10	0,40	0,98	1,33
0,20	0,40	1,00	1,22	0,39	1,00	1,22	0,41	1,00	1,22	0,37	1,00	1,21
0,25	0,32	1,01	1,12	0,30	0,98	1,33	0,33	1,01	1,16	0,30	1,11	1,10
0,30	0,25	1,02	0,87	0,22	0,96	0,86	0,26	1,01	1,03	0,23	1,00	1,02
0,35	0,19	1,01	0,92	0,16	0,95	0,89	0,20	1,00	0,94	0,17	0,97	0,98
0,40	0,15	1,00	0,98	0,25	1,09	0,93	0,16	0,99	0,92	0,12	0,97	0,97

Tabelle 2: Die Parameter ϵ , β_1 und β_2 , für die bei gegebenem λ die potentielle Energie E minimal ist

.....

E R G E B N I S S E FÜR 1236+ 921

.....

DIE VARIABLE ALPHA = XI WURDE VARIERT,
65-WURDE FÜR PI = 11 PUNKTE GERECHNET.

DIE PARAMETER FÜR DIE EINZELNEN PUNKTE SIND:

LAMDA	ETA	•	XI	•	BETA-1	BETA-2
1.0000	.0000		.0050		1.0600	1.0000
1.0000	.0200		.0500		.9500	1.2600
1.0000	.0400		.1000		.9200	1.3400
1.0000	.0600		.1500		.9700	1.3200
1.0000	.0800		.2000		1.0000	1.2200
1.0000	.1000		.2500		.9600	1.3300
1.0000	.1200		.3000		.9600	.8000
1.0000	.1400		.3500		.9500	.8900
1.0000	.1600		.4000		1.0900	.9300
1.0000	.1800		.4500		.9400	.9600
1.0000	.2000		.5000		.9400	.9800

POTENTIAL UND MASEN:

ALPHA	BRULL	ENULL	ITER. MASSE	CR. MASSE
0.0000	2.8087+00	2.8087+00	2.6312+04	3.3800+03
5.0000-02	6.6456+00	4.9740+00	1.3864+04	5.7981+03
1.0000-01	1.0584+01	2.7498+00	8.1482+03	4.9613+02
1.5000-01	2.2230+01	7.1690+01	7.1990+04	5.7825+03
2.0000-01	6.7567+01	0.0000	8.2625+04	5.7239+04
2.5000-01	9.6421+01	3.4441+00	4.1161+04	1.2524+04
3.0000-01	1.3599+02	2.9067+00	6.7027+04	6.3639+03
3.5000-01	2.7084+02	3.7785+00	2.1212+05	2.1825+04
4.0000-01	5.5536+02	5.8000+00	2.1001+05	3.0852+04
4.5000-01	8.6497+02	6.2452+00	6.4442+05	3.2918+04
5.0000-01	1.6957+03	7.0788+00	1.4559+06	4.4414+04

.....

Tabelle 3d: Hier sind die Endergebnisse der Rechnungen in den
Tabellen 3a - 3c als Computerausdruck wiedergegeben.

6. 4. 2. Vergleich der Massenparameter mit dem normalen Cranking-Modell

In den Fig. 6a bis 6d sind die Werte der Massenparameter für die verschiedenen λ -Werte in Abhängigkeit von der Massenasymetrie ξ wiedergegeben. Die mit a bezeichnete Kurve gibt den Massenparameter an, der mit dem nichtadiabatischen Cranking-Modell und der in Kapitel 6.3. beschriebenen Methode zur Integration der gekoppelten Differentialgleichungen berechnet wurde. Die Kurve Cr gibt zum Vergleich die Werte, die sich aus der herkömmlichen Cranking-Formel für den Massenparameter ergeben. Kurve b entspricht der Kurve a, nur wurde zur Integration nur die ungenauere zwei-Punkte-Formel zur Integration verwendet, während bei Kurve a genauere Verfahren benutzt wurden.

Interessant ist, daß der qualitative Verlauf der Kurven nach dem herkömmlichen und dem erweiterten Cranking-Modell sich nicht sehr voneinander unterscheidet, wobei insbesondere Maxima und Minima kaum gegeneinander verschoben sind. Generell ist der nichtadiabatische Massenparameter deutlich größer als der der herkömmlichen Rechnung. Das Verhältnis der beiden schwankt im Mittel zwischen 3 und 10, wird dann jedoch für $\xi > 0,25$ teilweise deutlich größer als 20. Eine weiter unten durchgeführte Betrachtung der Konvergenz der Störungsrechnung läßt diese großen Werte zweifelhaft erscheinen. Rechnungen, die probeweise für noch größere ξ -Werte durchgeführt wurden, bestätigen diese Tendenz des zu starken Ansteigens.

In den Fig. 6a - 6d wurden bereits die Ergebnisse gegenübergestellt, die mit verschiedenen Integrationsverfahren berechnet wurden. In Fig. 7 sind zusätzlich die Ergebnisse für verschiedene Schrittweiten $\Delta\xi$ bei der numerischen Integration wiedergegeben. Für die von $\Delta\xi=0,05$ verschiedenen

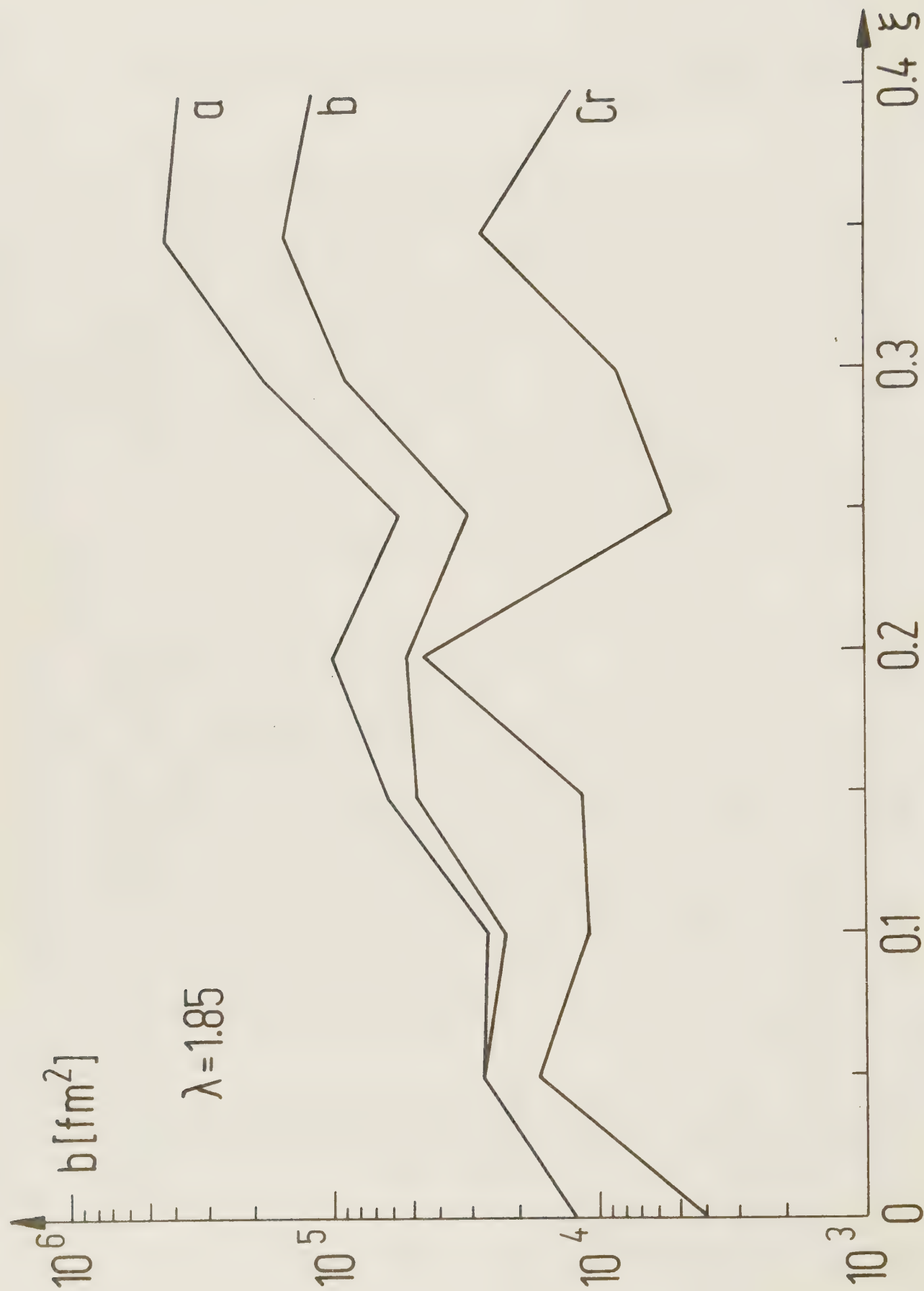


Fig. 6a Vergleich der Ergebnisse der normalen Cranking-Formel mit der nichtadiabatischen Rechnung für Uran-236 bei $\lambda=1,85$.

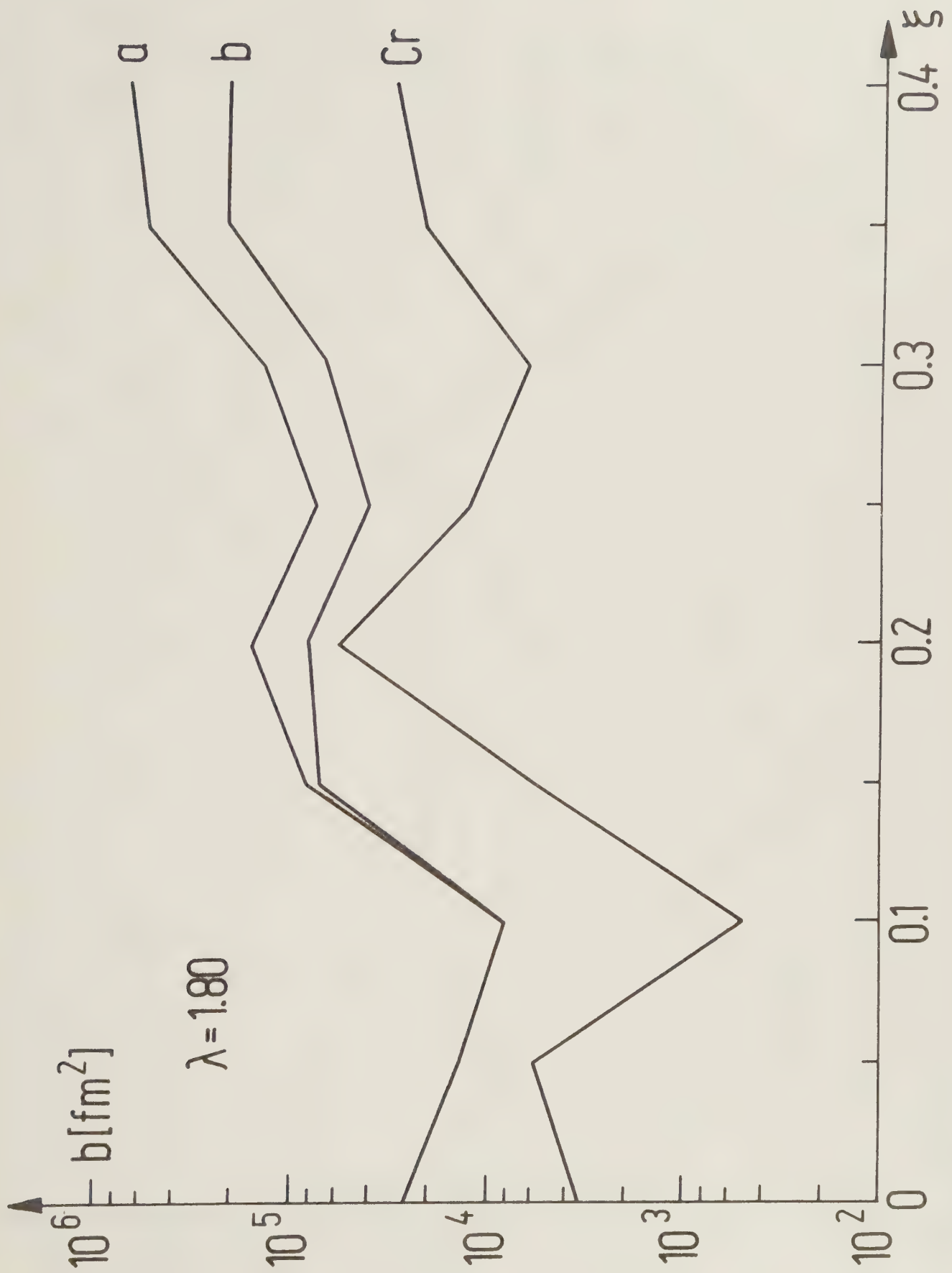


Fig. 6b Wie Figur 6a, für $\lambda=1,80$.

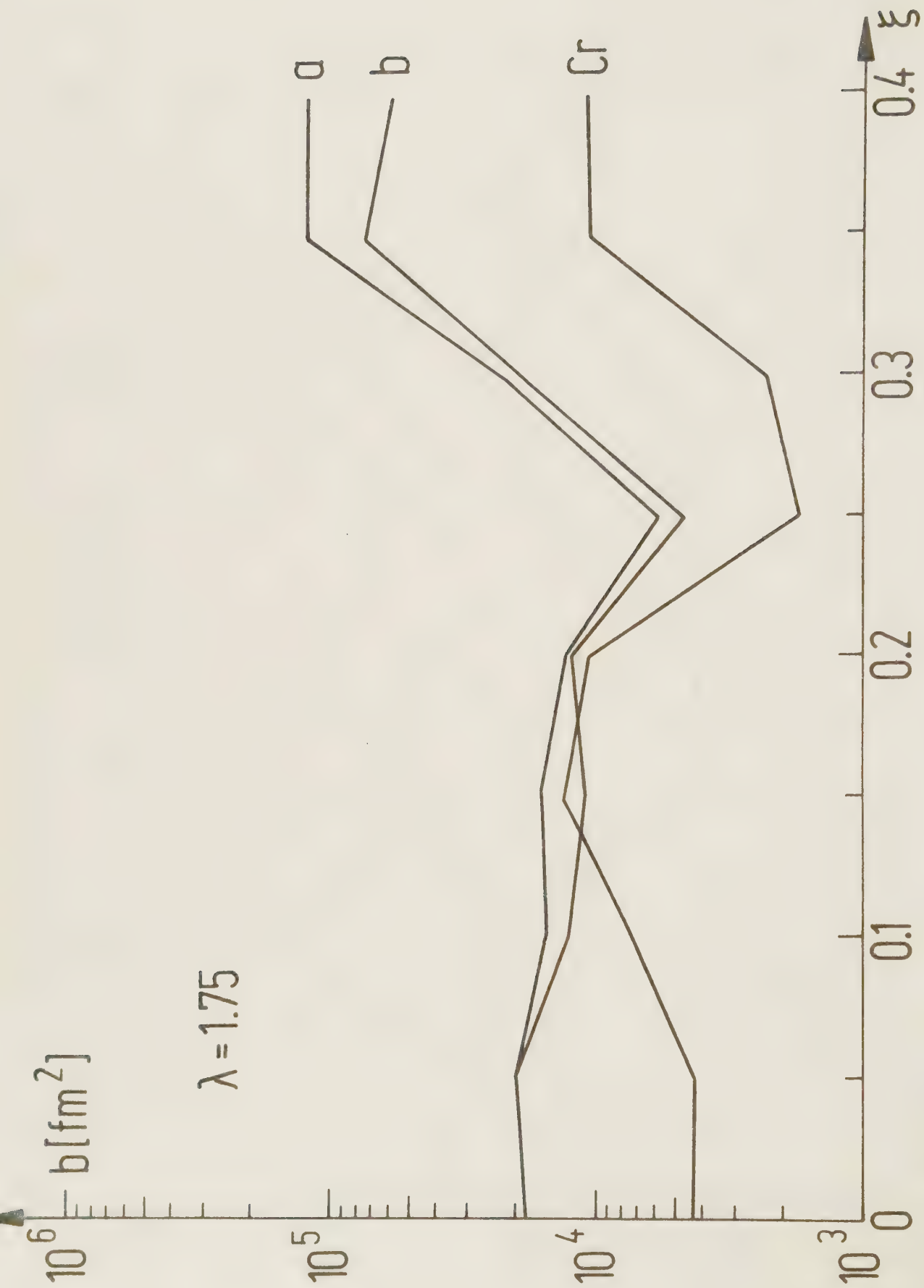


Fig. 6c Wie Figur 6a, für $\lambda=1,75$.

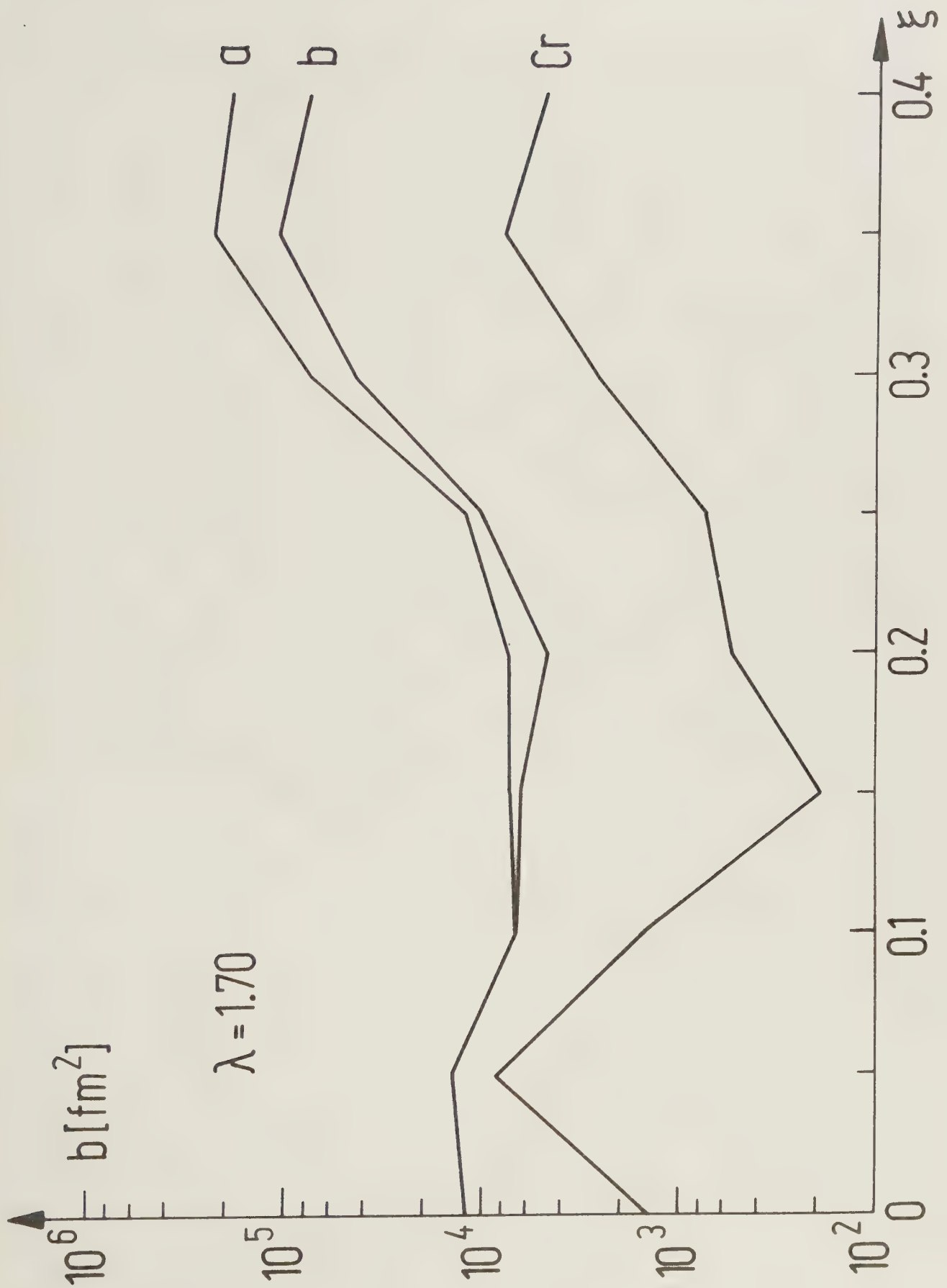


Fig. 6d Wie Figur 6a, für $\lambda = 1.70$.

Schrittweiten wurden die Größen k_{ij} aus (6.22), die bei der Integration benötigt werden, aus den entsprechenden Werten im Abstand $\Delta\xi=0,05$ interpoliert. Die auf diese Weise gewonnenen Kurven wurden dann den gesamten Rechnungen zugrundegelegt. Bei diesem Vorgehen liegt natürlich in der Wahl des Interpolationsverfahrens eine gewisse Willkür, die hauptsächlich durch starke Schwankungen der k_{ij} bedingt ist, da bei verschiedenen Interpolationsverfahren Lage und Höhe der Extremwerte stark schwankt. Aus diesem Grund wurden die weiteren Berechnungen auch mit dem Abstand $\Delta\xi=0,05$ durchgeführt, denn eine Erhöhung der Genauigkeit durch die Wahl eines geringeren Abstandes wäre nur scheinbar. Wie man aus Fig. 7 sieht, beträgt die Änderung des Massenparameters bei Änderung der Schrittweite etwa den Faktor zwei, nur an der Stelle $\xi=0,10$ beträgt die Abweichung der Kurve mit $\Delta\xi=0,02$ etwa den Faktor 3. Eine Abweichung der gleichen Größenordnung erhält man auch, wenn man ein anderes Interpolations- oder Integrationsverfahren wählt. Zur echten Erhöhung der Genauigkeit müßten deshalb weitere Zwischenpunkte wirklich aus dem Zweizentrenmodell heraus berechnet werden, was - wie oben schon gesagt wurde - nur mit sehr viel mehr Aufwand an Rechenzeit möglich wäre.

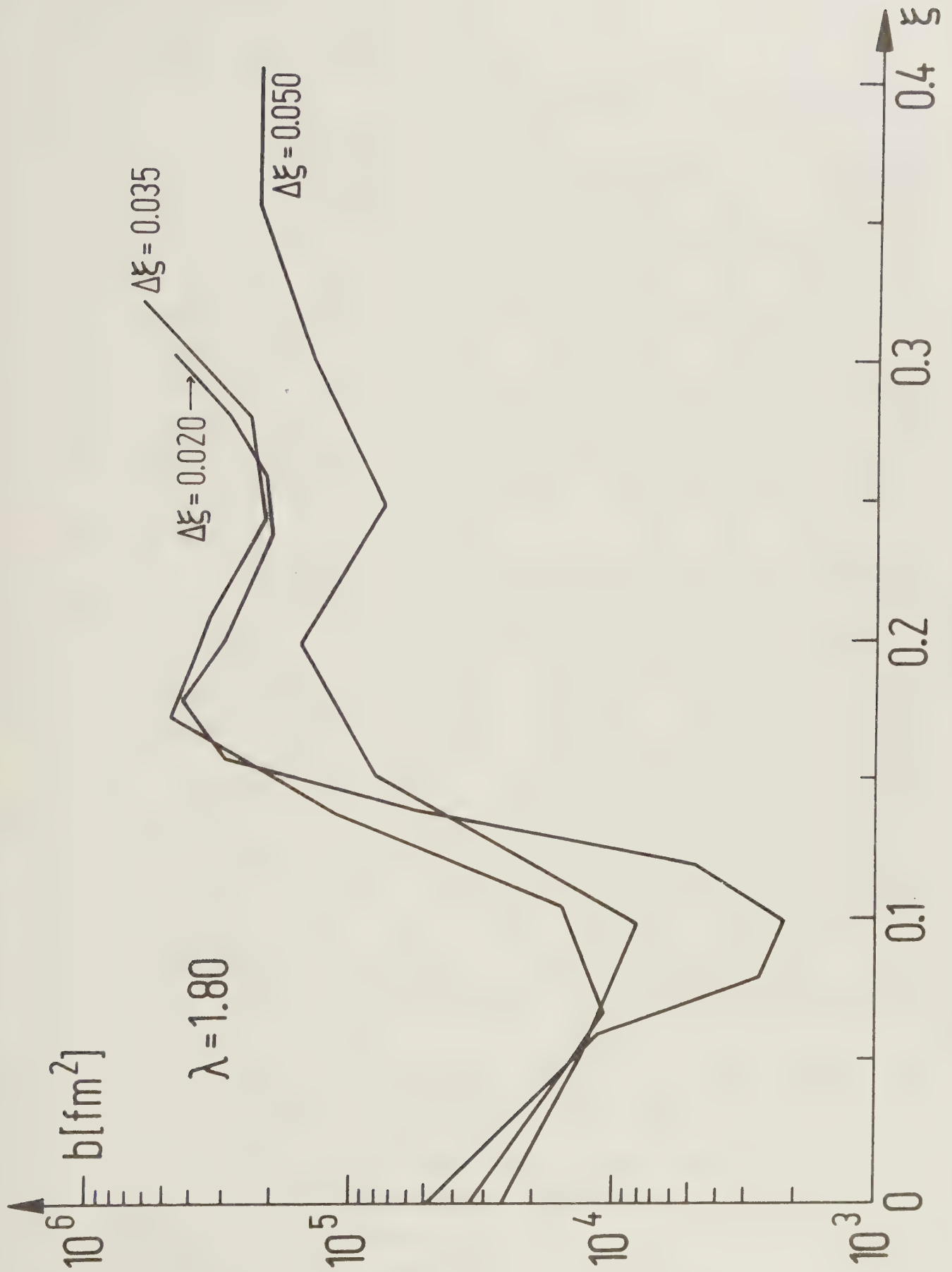


Fig. 7 Genauigkeitstest der numerischen Integration für verschiedene Werte von $\Delta\xi$.

6. 4. 3. Massen höherer Ordnung

In Tab. 4 sind die Massenparameter zweiter und vierter Ordnung gegenübergestellt. In diesem Beispiel ist $\lambda=1,85$, für andere Werte ergab sich jedoch das gleiche Bild, so daß auf die Darstellung dieser Tabellen hier verzichtet werden kann. Für verschiedene Werte von ξ sind zunächst die b_2 -Massen sowie die b_4 -Massen gegenübergestellt, die man entsprechend dem normalen und dem nichtadiabatischen Cranking-Modell erhält. Interessant ist, daß - im Gegensatz zu dem, was wir oben für die b_2 -Massen feststellen konnten - die b_4 -Massen im Vergleich zum normalen Cranking-Modell grob um den Faktor fünf kleiner geworden sind.

Ein direkter Vergleich der beiden Massen b_2 und b_4 ist wegen deren unterschiedlicher Dimension nicht möglich, zum Vergleich muß b_4 zunächst mit dem Quadrat der kollektiven Geschwindigkeit multipliziert werden, was sofort aus (2.40) zu sehen ist. Nimmt man eine Geschwindigkeit $\dot{\xi}$ von etwa $10^{-2}/\tau$ an, was einer kinetischen Energie in der Gegend einiger MeV entspricht, dann liegt - wie aus Tab. 4 leicht zu sehen ist - der von der Masse vierter Ordnung stammende Anteil der kinetischen Energie bis zu einer Größenordnung unter dem Anteil der b_2 -Masse. Bei der nichtadiabatischen Rechnung ist dies anders, hier wäre der Anteil der b_4 -Masse teilweise sogar größer als der der b_2 -Masse. Senkt man die kinetische Energie ab, so wird der relative Anteil der b_4 -Masse noch deutlich geringer.

Die Rückwirkung der b_4 -Masse auf die b_2 -Masse - wie am Ende von Kapitel 6.3. geschildert - gibt der Prozentsatz am Ende der Tabelle 4 an. Wie nach den bisherigen Ergebnissen zu sehen ist, liegt dieser Effekt deutlich unter den anderen Änderungen, so daß die nur angenäherte Behandlung gerechtfertigt war. Ein Vergleich der Massen vierter Ordnung, die sich nach dem herkömmlichen und nach dem nichtadiabatischen Modell ergeben, ist in Fig. 9 gezeigt.

ξ	$b_{cr} \quad b_{na}$ [fm ² /10 ⁴]	$b_{4cr} \quad b_{4na}$ [fm ² τ^2 /10 ⁸]	%
0,00	0,39 1,23	1,50 0,64	-
0,05	1,66 2,71	5,94 1,19	10,6
0,10	1,10 2,61	3,50 0,79	9,8
0,15	1,11 6,27	3,01 0,59	3,8
0,20	4,53 10,10	2,63 1,19	106,2
0,25	0,53 5,68	8,72 1,01	53,9
0,30	0,84 18,81	4,95 0,81	12,1
0,35	2,74 43,68	8,66 0,70	28,0
0,40	1,30 39,04	21,02 1,04	231,1

Tabelle 4: Vergleich der Massen zweiter und vierter Ordnung b_2 und b_4 , jeweils nach der gewöhnlichen und der nichtadiabatischen (cr bzw. na) Cranking-Formel gerechnet. Der Prozentsatz gibt den Grad der Kopplung zwischen b_2 und b_4 an. Die Werte sind gerechnet für $\lambda = 1,85$; die Zeiteinheit ist $\tau = 10^{-22}$ sec

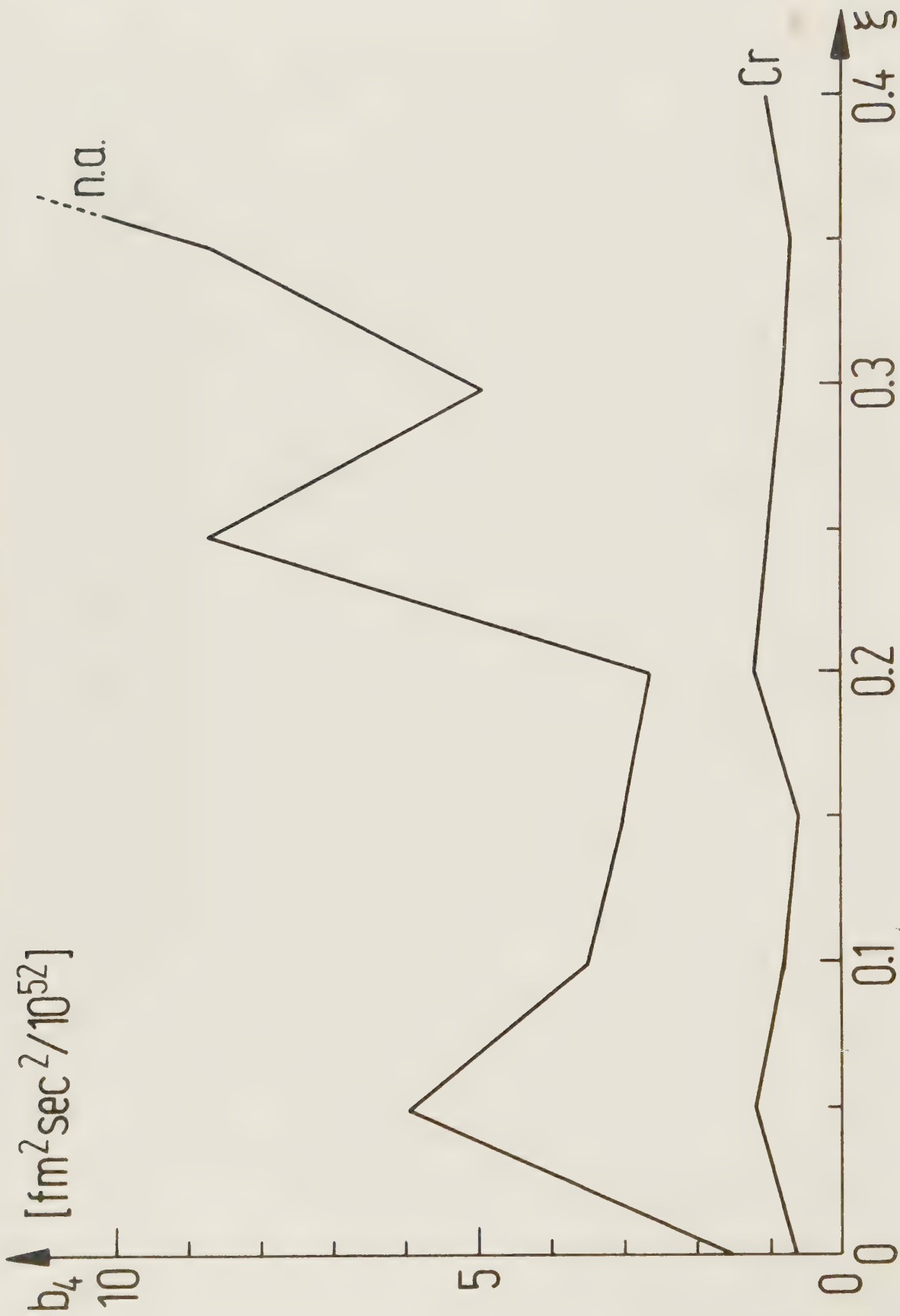


Fig. 8 Massenparameter vierter Ordnung für $\lambda=1,85$. Kurve n.a. stellt die Ergebnisse der nichtadiabatischen Rechnung dar, Kurve Cr zeigt zum Vergleich die Ergebnisse der herkömmlichen Rechnung.

6. 4. 4. Abhängigkeit des Potentials von der inneren Anregung

Nicht ohne weiteres zu erklären ist der immer stärker werdende Anstieg des b_0 -Terms schon bei relativ kleinen Werten von ξ (siehe Tab. 1 und Fig. 9). Er hat seine Ursache darin, daß die Störungsrechnung, auf der die durchgeführten Untersuchungen basieren, nur bis zu einer maximalen kollektiven kinetischen Energie konvergiert. Auf die entsprechenden Untersuchungen wird im nächsten Abschnitt noch eingegangen, die maximale Gesamtenergie liegt in der Größenordnung einiger MeV.

Daraus resultiert, daß die Berechnungen nur in einer bestimmten Umgebung des Startpunktes der Integration als ausreichend genau angesehen werden können. Deshalb wurden die gleichen Rechnungen wie oben auch mit dem Minimum des gewöhnlichen Potentials E_0 als Startpunkt der Integration durchgeführt. Da dort $E_0' = 0$ ist und deshalb auch $b_0' = 0$ und $b_0 = E_0$ angenommen werden kann, gelten die in Kapitel 6.3. durchgeführten Überlegungen hier analog. Die Ergebnisse für die Massenparameter b_2 sind in den Fig. 10a bis 10d dargestellt (Kurve b) und mit den Werten um den Ursprung als Startpunkt (Kurve a) verglichen. Die Stelle des Potentialminimums ist in den Figuren jeweils durch einen Pfeil gekennzeichnet.

Wieder ist festzustellen, daß die beiden Kurven qualitativ recht gut übereinstimmen, zumindest in einer größeren Umgebung der Stelle des Potentialminimums. Für $\lambda = 1,80$ und $\lambda = 1,70$ sind am Minimum selbst die beiden Kurven praktisch identisch, für $\lambda = 1,85$ und $\lambda = 1,75$ beträgt der Faktor der Abweichung etwa 3. Stärkere Abweichungen ergeben sich nur

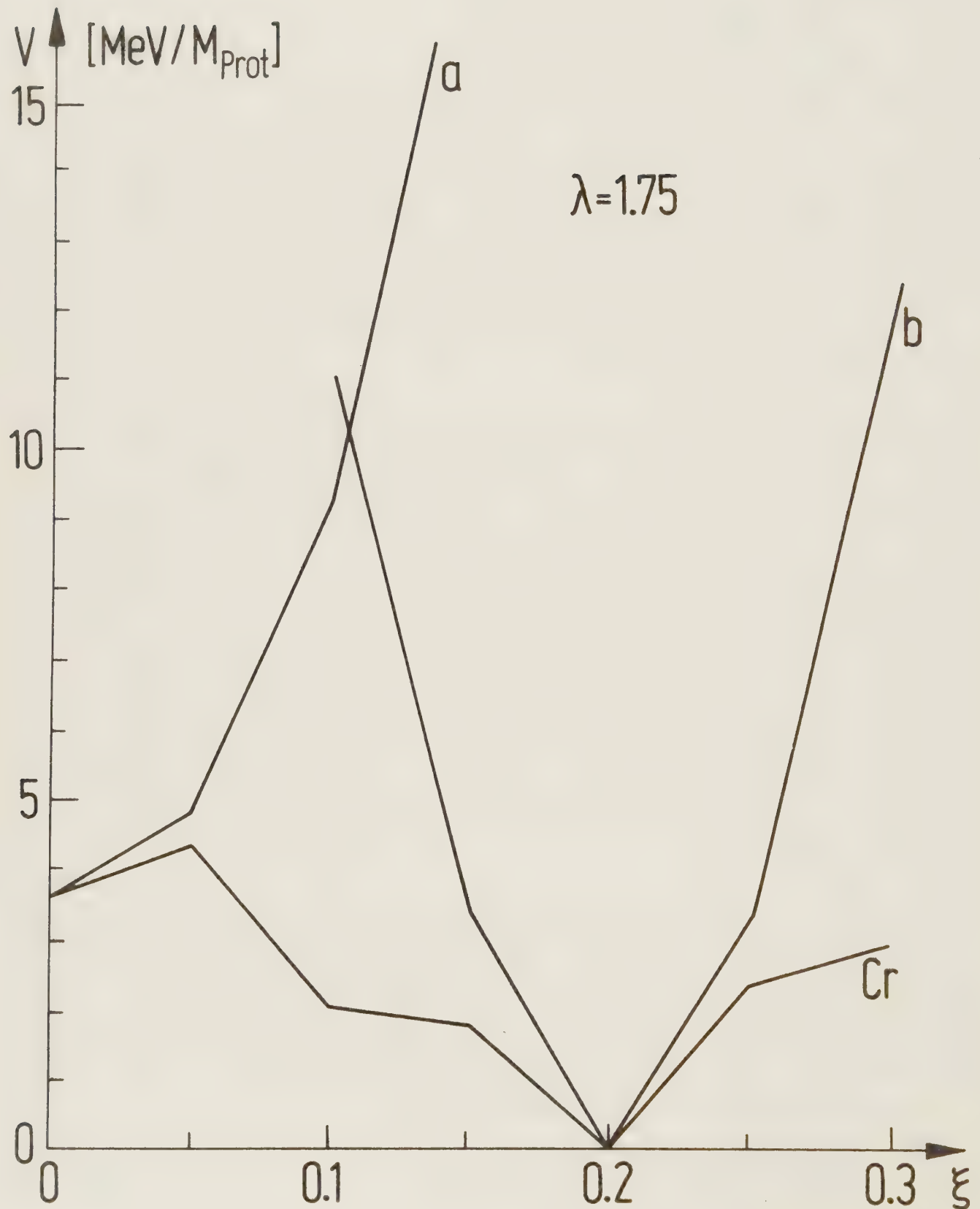


Fig. 9 Vergleich der Potentiale E_0 und b_0 . Die Kurve a hat als Startpunkt der Integration den Ursprung $\xi=0$, Kurve b das Minimum des Potentials E_0 , das in der Figur mit Cr bezeichnet ist.



Fig. 10a Vergleich der Massenparameter, die man erhält, wenn man als Startpunkt der Integration den Ursprung (Kurve a) bzw. das Minimum des adiabatischen Potentials (Kurve b) wählt. Das Minimum ist durch einen Pfeil gekennzeichnet. $\lambda = 1,85$.



Fig. 10b Wie Figur 11a, jedoch für $\lambda=1,80$.

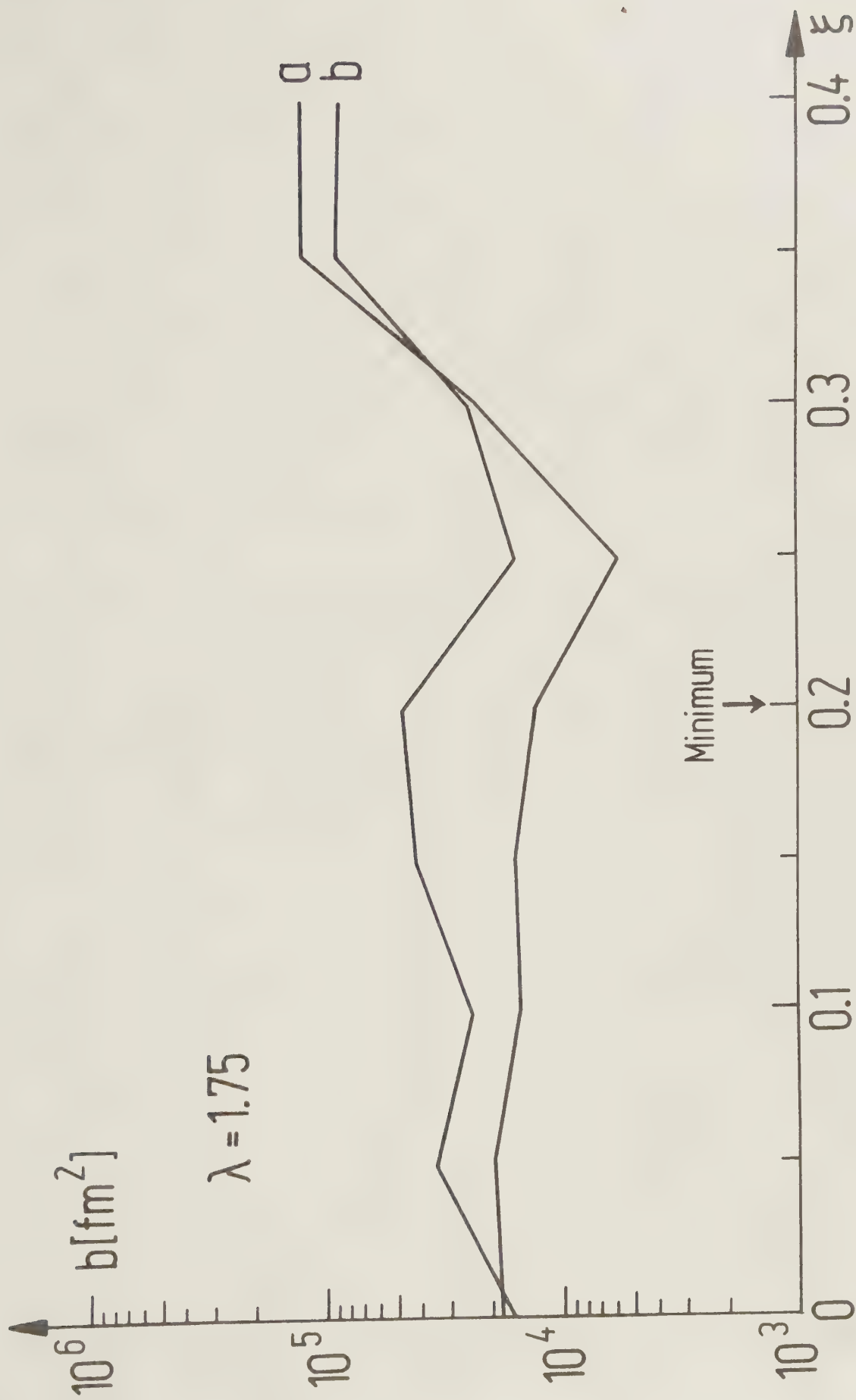


Fig. 10c Wie Figur 11a, jedoch für $\lambda = 1.75$.



Fig. 10d Wie Figur 11a, jedoch für $\lambda=1,70$.

in der Gegend $\xi=0$ und für sehr große ξ -Werte.

Der entsprechende Vergleich der Werte für das Potential b_0 ist in Fig. 9 dargestellt. a und b entsprechen der obigen Bezeichnung, die mit Cr bezeichnete Kurve gibt das Potential E_0 wieder, das sich aus dem gewöhnlichen Cranking-Modell ergibt. Hier sind die Abweichungen wesentlich stärker. In einem relativ engen Bereich stimmt b_0 mit E_0 fast überein, um dann sehr schnell anzusteigen. Deshalb werden im nächsten Abschnitt einige Überlegungen zur Konvergenz der Störungsrechnung durchgeführt.

Um zu zeigen, daß sich ein derart starker Anstieg des Potentials tatsächlich aus dem Differentialgleichungssystem (2.43) bis (2.45) ergibt und nicht etwa auf Ungenauigkeiten bei der in Abschnitt 6.3. durchgeführten numerischen Integration zurückzuführen ist, wurde die Differentialgleichung (6.18) für einen einfachen Fall analytisch gelöst (siehe Fig. 11). Dazu wurde ein linear ansteigendes Potential mit der Steigung γ angenommen

$$E_0(\alpha) = E_0(0) + \gamma\alpha \quad (6.41)$$

wobei zusätzlich noch ohne Beschränkung der Allgemeinheit $E_0(0)=0$ gesetzt wurde. Die Differenz $h(\alpha)$ zwischen b_0 und E_0 wurde analytisch berechnet

$$h(\alpha) = b_0(\alpha) - E_0(\alpha) = b_0(\alpha) - \gamma\alpha \quad (6.42)$$

Aus der Differentialgleichung (6.18) wird damit

$$\frac{db_0}{d\alpha} = \pm K \sqrt{b_0(\alpha) - \gamma\alpha} ; \quad K = 2b_2/\sqrt{k_{11}} \quad (6.43a)$$

bzw.

$$\frac{dh}{d\alpha} = \pm K \sqrt{h(\alpha)} - \gamma \quad (6.43b)$$

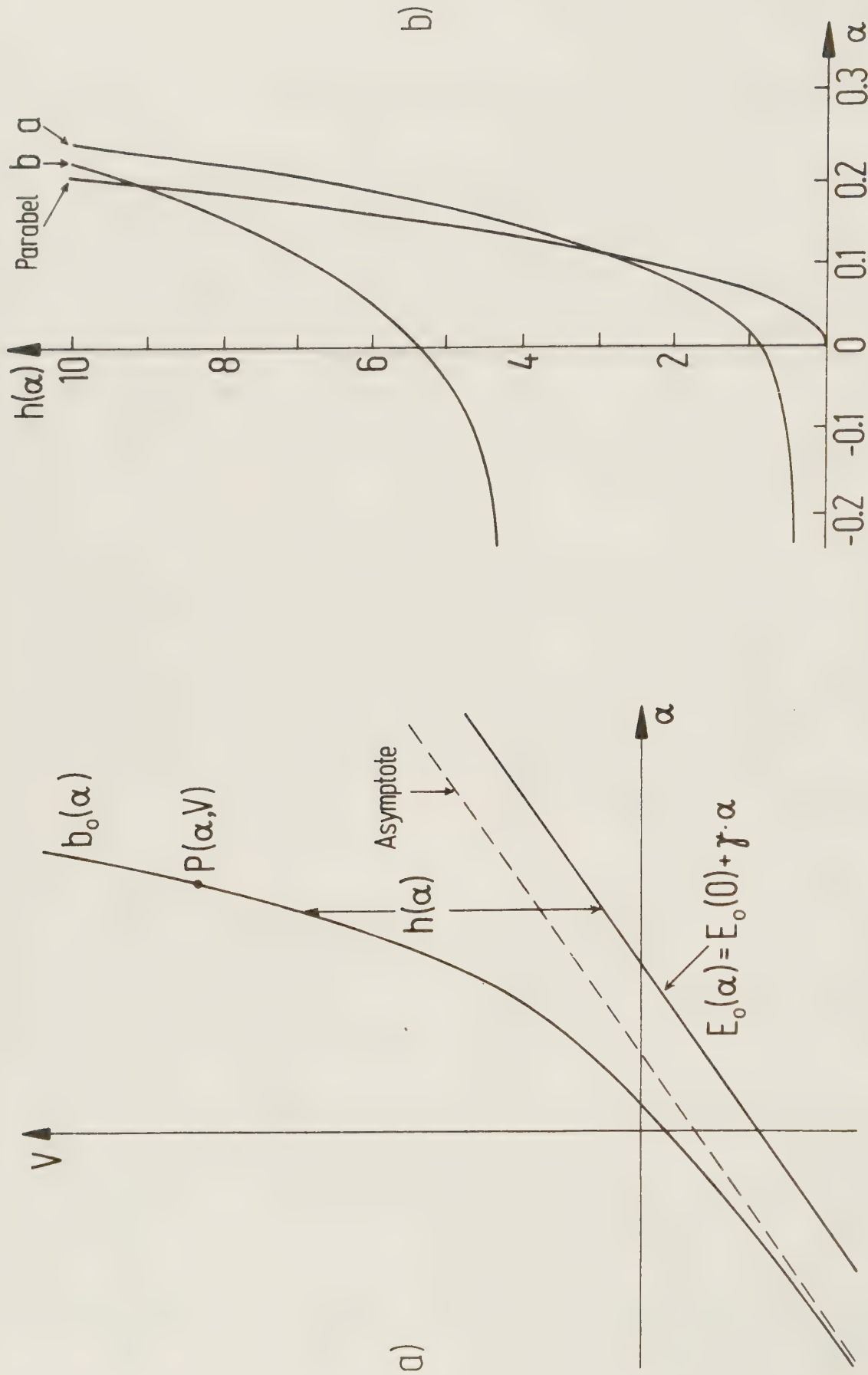


Fig. 11 In Teil a der Figur ist der Verlauf von $b_0(\alpha)$ skizziert, wenn man als Potential $E_0(\alpha)$ eine konstant steigende Gerade voraussetzt. Die Bezeichnungen des Textes sind dargestellt. Im Teil b sind Lösungen $h(\alpha)$ zu verschiedenen Parametern dargestellt. Für genauere Erläuterungen siehe Text.

Die Substitutionen

$$z(\alpha) = \sqrt{h(\alpha)} ; \quad a = \gamma/K \quad (6.44)$$

liefern nach Trennung der Variablen

$$\pm \frac{2z \cdot dz}{(z-a)/K} = K^2 \cdot d\alpha \quad (6.45)$$

Das Integral dieser Gleichung lautet

$$2Kz + \frac{2 \cdot a}{K} \ln\{(z-a)/K\} + C = \pm K^2 \alpha \quad (6.46a)$$

bzw. nach Einsetzen von (6.44) und Auflösen nach

$$\pm \alpha = 2 \cdot \sqrt{h(\alpha)} / K + (2\gamma/K^2) \cdot \ln\{(\sqrt{h(\alpha)} - \gamma)/K\} + C \quad (6.46b)$$

Der Faktor $1/K$ im Nenner von (6.45), der zunächst überflüssig erscheint, ist nötig, damit das Argument des Logarithmus dimensionslos wird. Die Wahl eines zusätzlichen Vorfaktors dieses Argumentes entspricht im übrigen lediglich einer anderen Wahl der Integrationskonstante C . Die Funktion in (6.46b) analytisch nach $h(\alpha)$ aufzulösen ist kaum durchführbar, jedoch ist die entsprechende graphische Darstellung leicht zu erhalten und in Fig. 10b für charakteristische Werte von K und γ dargestellt. Diese Werte sind: $K = 30 \text{ fm} \cdot \text{MeV}^{-1/2}$ sowie $\gamma = 60 \text{ MeV}$ (Kurve b), $\gamma = 20 \text{ MeV}$ (Kurve a) und $\gamma = 0$ (Parabel).

Wie aus (6.46b) zu entnehmen ist, ist $b_0(\alpha)$ für $\gamma = 0$ eine Parabel (vergleiche hierzu das "anschauliche Beispiel" in Kapitel 5). Bei Vorhandensein einer Steigung von E_0 tritt der exponentielle Teil hinzu, b_0 nähert sich dann für $\alpha \rightarrow \infty$ einer Asymptote, die parallel zu E_0 verläuft und steigt für große positive α praktisch exponentiell an. Die Änderung der Integrationskonstanten C bedeutet eine Verschiebung der Kurve b_0 entlang der Geraden E_0 . Wegen der Möglichkeit

der freien Wahl des Vorzeichens von α in (6.46b) ist auch die an $\alpha=0$ gespiegelte Funktion $h(\alpha)$ eine Lösung.

Durch diese durch die Integrationskonstante gegebene Freiheit kann die Kurve b_0 durch jeden beliebigen Punkt $P(\alpha, V)$ gehen. Physikalisch entspricht dies einer Vorgabe der Anfangsbedingung, nämlich der inneren Anregung des Kollektivsystems ($b_0 - E_0$) für einen festen Wert von α . In realistischen Fällen ist natürlich die freie Verschiebbarkeit in α -Richtung nicht mehr gegeben, da $dE_0/d\alpha$ nicht mehr konstant ist. Jedoch ist die innere Anregung frei wählbar, was aber einen Verzicht auf die Symmetrie bezüglich $\alpha=0$ bedeutet. Die Durchführung entsprechender Rechnungen für verschiedene innere Anregungen wäre eine sinnvolle Ergänzung der Arbeit.

Wie aus Fig. 10b zu ersehen ist, ergibt sich auch analytisch ein sehr starker Anstieg von b_0 . Wie eine grobe Betrachtung höherer Terme der Störungsrechnung aus Anhang C und den Gleichungen (2.36) bzw. (2.39) zeigt, kommen zu b_0 in (6.18) durch Terme sechster Ordnung noch Ausdrücke der Form

$$2 \cdot \text{Re}(c_2 c_4^*) = b_0'^2 \cdot A + b_0' b_0'' \cdot B + b_0'^3 \cdot C \quad (6.47)$$

hinzu. A, B und C sind Funktionen von b_2 , b_4 und den Matrixelementen. Wie man sieht, sind die beiden letzten Terme in der Lage, den qualitativen Verlauf von b_0 zu beeinflussen. Eine Erweiterung der Rechnungen auf Störterme der sechsten Ordnung wäre daher sinnvoll, ist jedoch mit einem sehr großen rechnerischen und numerischen Aufwand verbunden.

6. 4. 5. Überlegungen zur Konvergenz der Störungsrechnung

Damit die Störungsrechnung konvergiert, darf bekanntlich das Matrixelement $\langle n0 \rangle / \Delta_n$ bestimmte Größenordnungen nicht überschreiten. Für unser spezielles Problem gilt (vergleiche (2.36))

$$|c_n^{(j)}|^2 < 1 \quad (6.48)$$

woraus nach (C.5) für $|c_n^{(j)}|^2$ folgt

$$\dot{\alpha}^2 n^2 \frac{|\langle n0 \rangle|^2}{\Delta_n^2} < 1 \quad (6.49)$$

oder

$$\dot{\alpha}^2 < \frac{\Delta_n^2}{n^2 |\langle n0 \rangle|^2} \quad (6.50)$$

Das bedeutet, daß die Konvergenz der Störungsrechnung von der Größe der Kollektivgeschwindigkeit abhängt. Für die Bewegung in einem Potential, bei der potentielle Energie in kinetische übergeht und umgekehrt, heißt das, daß die Gesamtenergie einen bestimmten Betrag nicht überschreiten darf. In dem Bereich, in dem das Potential größer ist als diese Gesamtenergie, konvergiert die Störungsrechnung nicht mehr.

In der Tab. 5a sind für die verschiedenen λ -Werte die Abschätzungen für das höchstzulässige $\dot{\xi}$ und die maximale kinetische Energie bzw. Gesamtenergie durchgeführt, und zwar sowohl für $\xi=0$ als auch im Potentialminimum. Wie man sieht, liegt das maximale $\dot{\xi}$ bei etwa $10^{-2}/\tau$ und die höchstzulässige Energie bei einigen MeV. Hierbei ist noch zu bemerken, daß für die Abschätzung nur das jeweils betragsgrößte Matrixelement herangezogen wurde. Eine Berücksichtigung aller Matrixelemente würde etwa ein Drittel bis die Hälfte der Werte in der Tabelle ergeben.

λ	$\dot{\alpha}^2$		b_2		$E_{kin} = b_2 \dot{\alpha}^2$	
	Z	M	Z	M	Z	M
1,85	9 E-4	2 E-4	1,2 E4	6,3 E4	10	13
1,80	7 E-4	4 E-5	2,6 E4	1,6 E5	18	6
1,75	7 E-4	2 E-3	1,8 E4	1,3 E4	13	3
1,70	2 E-4	1 E-2	1,2 E4	7,5 E3	24	75

Tabelle 5a: Abschätzung der maximal zulässigen Kollektivgeschwindigkeit
 bzw. kinetischen Energie, für die die Störungsrechnung konvergiert.
 Untersucht wurde der Einfluß des betragsgrößten Matrixelementes.
 Berücksichtigung aller Matrixelemente halbiert bis drittelt diese
 Werte. Z = im Zentrum ($\xi=0$), M = im Potentialminimum.

	λ	b_2		b_4		b_2/b_4	$E_{kin} = b_2 \dot{\alpha}^2$	
		Z	M	Z	M	Z	M	
n.a.	1,85	1,2 E4	6,3 E4	6,4 E7	5,9 E7	1,9 E-4	1,1 E-3	2,3 69
	1,80	2,6 E4	1,6 E5	2,3 E8	6,8 E7	1,1 E-4	2,4 E-3	2,9 380
	1,75	1,8 E4	1,3 E4	6,3 E6	1,7 E7	2,9 E-3	7,6 E-4	52 9,9
	1,70	1,2 E4	7,5 E3	3,0 E8	1,5 E6	4,0 E-5	5,0 E-3	0,5 38
cr.	1,85	3,9 E3	1,2 E4	1,5 E8	3,0 E8	2,6 E-5	4,0 E-5	0,1 0,5
	1,80	3,4 E3	5,7 E4	6,2 E8	2,1 E9	5,5 E-6	2,7 E-5	0,02 1,5
	1,75	4,3 E3	1,1 E4	1,6 E7	8,8 E8	2,7 E-4	1,3 E-5	1,2 0,1
	1,70	1,4 E3	5,4 E2	8,4 E8	4,7 E7	1,7 E-6	1,1 E-5	0,002 0,006

Tabelle 5b: Untersuchung des Einflusses der Massen vierter Ordnung auf die
 Konvergenz, Bezeichnungen wie oben. n.a. = nichtadiabatisches
 Modell, cr. = normales Cranking-Modell zum Vergleich. E_{kin} in MeV.

Wie man aus der Reihenentwicklung für die Gesamtenergie (2.40) leicht sieht, muß zur Konvergenz auch gelten

$$|\dot{\alpha}^2 \cdot b_{n+2}/b_n| < 1 \quad (6.51)$$

bzw.

$$\dot{\alpha}^2 < |b_n/b_{n+2}| \quad (6.52)$$

Wie aus Anhang C zu ersehen ist, stimmt das mit der oben gemachten Forderung für die Größe der Matrixelemente überein, denn bei den Massen höherer Ordnung treten jeweils entsprechend höhere Potenzen der Matrixelemente auf. Zum Vergleich wurde die Abschätzung jedoch auch für die b_4 -Masse durchgeführt, die Ergebnisse sind in Tab. 5b dargestellt. Wie man sieht, ergibt sich für $\dot{\alpha}$ und E_{kin} die gleiche Größenordnung wie oben.

In der gleichen Tabelle wird eine Abschätzung gezeigt, die für die b_4 -Masse im adiabatischen Cranking-Modell gemacht wurde. Hier liegt die höchstzulässige Gesamtenergie um etwa eine Größenordnung niedriger.

Das zu starke Ansteigen des Potentials in Fig. 8 erklärt sich somit daraus, daß in diesem Bereich die Konvergenz der Störungsrechnung in Frage gestellt ist. Natürlich reicht auch schon etwas unterhalb der Maximalenergie die Berücksichtigung der Glieder vierter Ordnung in der Störungsrechnung nicht mehr aus, um eine ausreichende Genauigkeit zu erzielen. Dies bedeutet allerdings noch nicht, daß nicht über einen größeren Bereich von ξ -Werten gerechnet werden kann, denn durch die schlechte Konvergenz nahe der Maximalenergie kann der b_0 -Wert zu stark ansteigen und ein zu frühes Ende des zulässigen Bereiches vortäuschen. Hier müssen noch weitere Rechnungen mit höheren Ordnungen der Störungsrechnung gemacht werden.

7. Schlußfolgerungen

Aus dem anschaulichen Beispiel in Kapitel 5. können wir erkennen, daß die Ergebnisse des nichtadiabatischen Cranking-Modells mit den exakten Resultaten wesentlich besser übereinstimmen als diejenigen, die man mit der üblichen Cranking-Formel erhält. Sogar wenn die Störfrequenz ω_2 von gleicher Größenordnung ist wie ω_1 , wird der Fehler um den Faktor 3 bis 8 verringert (siehe Fig. 4). Offensichtlich steigt jedoch der Fehler sehr schnell an, wenn die kollektive Frequenz sehr groß wird. Dies erklärt sich daraus, daß die Kollektivbewegung zu schnell wird als daß die Teilchen ihr ohne Verzögerung folgen könnten. Mathematisch wird die Kollektivbewegung als eine Störung der stationären Schroedinger-Gleichung (2.2) behandelt, und für starke Störungen ist die Konvergenz der Störungsrechnung zumindest nicht gut, sofern die Reihe überhaupt konvergiert. Die hier durchgeführte Störungsrechnung wurde bei der vierten Ordnung abgeschnitten; die Berücksichtigung höherer Ordnungen würde sicher bessere Resultate ergeben. Jedoch sind die hiermit erhaltenen Werte schon erheblich besser als die, die man mit der normalen Cranking-Formel erhält.

Höhere Ordnungen der Störungsrechnung wurden schon in anderen Rechnungen untersucht¹², wobei geschwindigkeitsabhängige Massen auftraten. Da dabei jedoch der Störoperator von (2.5) verwendet wurde, waren diese Rechnungen nur für konstante Geschwindigkeit gültig. Die hier hergeleitete Methode fügt jedoch auch Korrekturen zu dem geschwindigkeitsunabhängigen Teil der Cranking-Masse hinzu.

Aus den praktischen Rechnungen in Kapitel 6. wird deutlich, daß die Vernachlässigung des adiabatischen Terms der Störung

in (2.3) sich deutlich bemerkbar macht. Die Massenparameter werden um den Faktor 2 bis 3, teilweise auch bis zum Faktor 10 größer. Die Lage der Maxima und Minima ändert sich jedoch nicht. Zusätzlich berücksichtigt werden müßten bei weiteren Rechnungen noch höhere Terme der Störungsrechnung, wenn man auch in den Bereichen genaue Ergebnisse haben will, die weiter vom Potentialminimum entfernt sind. Dort wird es auch interessant, Massen höherer Ordnung in die Berechnung mit einzubeziehen, was im Minimum des Potentials sicher nicht nötig ist.

Anhang A: Allgemeine Lösung für die Lagrangefunktion

Gleichung (2.9)

$$\sum_{i=1}^s \dot{\alpha}_i \frac{\partial L(\alpha, \dot{\alpha})}{\partial \dot{\alpha}_i} - L(\alpha, \dot{\alpha}) = E(\alpha, \dot{\alpha}) \quad (\text{A.1})$$

ist eine nichthomogene partielle Differentialgleichung erster Ordnung für die Lagrangefunktion L . Somit erhält man ihre allgemeine Lösung, indem man zu der speziellen Lösung (2.17) eine allgemeine Lösung L_0 der entsprechenden homogenen Gleichung addiert. Wenn man L_0 in Potenzen von $\dot{\alpha}$ entwickelt, hat es die Form

$$L_0(\alpha, \dot{\alpha}) = \sum_{i=1}^s C_i(\alpha) \dot{\alpha}_i \quad (\text{A.2})$$

wobei die C_i willkürliche Funktionen der Kollektivkoordinaten sind. Da L_0 von ungerader Potenz in den kollektiven Geschwindigkeiten ist, ist es nicht invariant unter Zeitumkehr. Folglich können wir die Funktion L aus (2.17) als die in Frage kommende Lagrangefunktion betrachten.

Es muß noch erwähnt werden, daß unter gewissen Umständen die Lagrangegleichungen (2.8) durch L_0 nicht beeinflußt werden. Wenn gilt

$$C_i(\alpha) = \frac{\partial F(\alpha)}{\partial \alpha_i} ; \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (\text{A.3})$$

wobei F eine bestimmte Funktion der Kollektivkoordinaten ist, dann haben wir

$$L_0(\alpha, \dot{\alpha}) = \frac{d}{dt} F(\alpha) \quad (\text{A.4})$$

Addieren wir nun in (2.8) zu L die Funktion L_0 dazu, dann ändern sich die Bewegungsgleichungen nicht.

Anhang B: Die Normierung der gestörten Wellenfunktion

Da die Norm der Wellenfunktion offensichtlich von α und $\dot{\alpha}$ abhängt, wirkt der Störoperator $\hat{V}$ auf sie. Es wird nun gezeigt, daß es dennoch nicht notwendig ist, nach jedem Schritt der Störungsrechnung getrennt zu normieren, wenn man die Wellenfunktion entsprechend (2.22) und (2.23) entwickelt.

Die exakte Wellenfunktion der Gleichung (2.1) wird durch die Wellenfunktion der Störungsrechnung angenähert

$$\Psi_{\lambda} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int^t \epsilon d\tau \right) \phi_{\lambda} \quad (\text{B.1})$$

wobei die Wellenfunktion ϕ_{λ} die durch den Störparameter λ modifizierte Schroedingergleichung löst.

$$(H - \lambda i \hbar \frac{\partial}{\partial t}) \phi_{\lambda} = \epsilon \phi_{\lambda} \quad (\text{B.2})$$

(siehe auch (2.22) bis (2.26))

Die Norm der Funktion Ψ_{λ} ist nicht notwendigerweise zeitlich konstant. Um ihre Zeitabhängigkeit festzustellen, berechnen wir zunächst die Norm von ϕ_{λ} , indem wir (B.2) mit der dazu konjugierten Wellenfunktion multiplizieren und das Ergebnis von dem dazu konjugiert komplexen abziehen, wodurch wir erhalten

$$i\hbar \left(\langle \phi_{\lambda} | \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\lambda} \rangle + \langle \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\lambda} | \phi_{\lambda} \rangle \right) = (\epsilon^* - \epsilon) \langle \phi_{\lambda} | \phi_{\lambda} \rangle \quad (\text{B.3})$$

Damit ist

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_{\lambda} | \phi_{\lambda} \rangle = -\frac{2}{\lambda \hbar} \text{Im}(\epsilon) \langle \phi_{\lambda} | \phi_{\lambda} \rangle \quad (\text{B.4})$$

Diese Differentialgleichung wird durch den Ansatz

$$\langle \phi_{\lambda} | \phi_{\lambda} \rangle = N \cdot \exp \left(-\frac{2}{\lambda \hbar} \int^t \text{Im}(\epsilon) d\tau \right) ; \quad N = \text{const.} \quad (\text{B.5})$$

gelöst. Daraus ergibt sich die Norm der Wellenfunktion Ψ_λ zu

$$\langle \Psi_\lambda | \Psi_\lambda \rangle = N \cdot \exp\left\{\frac{2}{\hbar}\left(1-\frac{1}{\lambda}\right) \int^t \text{Im}(\varepsilon) d\tau\right\} \quad (\text{B.6})$$

Somit ist die Norm von Ψ_λ zeitlich konstant, wenn $\lambda=1$ ist. Wenn wir im weiteren Verlauf der Störungsrechnung $\lambda=1$ setzen, haben wir es also tatsächlich mit einer Wellenfunktion mit zeitunabhängiger Norm zu tun. (Vergleiche dazu auch (2.38) und (2.39))

Anhang C: Berechnung der Koeffizienten der gestörten Wellenfunktion

Für die Berechnung der Koeffizienten $c_n^{(j)}$ aus (2.30), die hier bis zur dritten Ordnung durchgeführt wird, benötigen wir die Energien ϵ_1 und ϵ_2 aus Gleichung (2.26)

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \langle \phi_{n_0} | \hat{V} | \phi_{n_0} \rangle \\ \epsilon_2 &= \sum_{n \neq n_0} \langle \phi_{n_0} | \hat{V} | \phi_n \rangle c_n^{(1)}\end{aligned}\tag{C.1}$$

Wegen

$$\langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \phi_n \rangle = - \langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \phi_m \rangle^* \tag{C.2}$$

und der Annahme, daß die Matrixelemente reell sind, erhalten wir

$$\epsilon_1 = -i\hbar\dot{\alpha} \langle \phi_{n_0} | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \phi_{n_0} \rangle = 0 \tag{C.3}$$

Mit der Abkürzung

$$\langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial \alpha} | \phi_n \rangle = \langle mn \rangle \tag{C.4}$$

lauten die expliziten Ausdrücke für die $c_n^{(j)}$ schließlich

$$\begin{aligned}c_n^{(1)} &= i\dot{\alpha} K_{11n} \\ c_n^{(2)} &= f \cdot K_{21n} + \dot{\alpha}^2 K_{22n} \\ c_n^{(3)} &= i\dot{\alpha} \{ f \cdot K_{31n} + (\frac{\partial f}{\partial \alpha} - \frac{f}{\alpha} \frac{\partial f}{\partial \alpha}) K_{32n} \} + i\dot{\alpha}^3 K_{33n}\end{aligned}\tag{C.5}$$

Dabei sind die K_{ijn} Ausdrücke, die nur Matrixelemente der Form $\langle m n \rangle$ enthalten:

$$K_{11n} = \bar{n} \frac{\langle n n_o \rangle}{\Delta_n} \quad (C.6)$$

$$K_{21n} = \bar{n}^2 \frac{\langle n n_o \rangle}{\Delta_n^2}$$

$$K_{22n} = -\bar{n}^2 \sum_{l \neq n_o} \frac{\langle n l \times l n_o \rangle}{\Delta_n \Delta_l} - \frac{\bar{n}^2}{\Delta_n} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle n n_o \rangle}{\Delta_n}$$

$$K_{31n} = \bar{n}^3 \left\{ \sum_{l \neq n_o} \left(\frac{\langle nl \rangle \langle ln_o \rangle}{\Delta_n \Delta_l^2} + \frac{2 \langle nl \rangle \langle ln_o \rangle}{\Delta_n^2 \Delta_l} \right) + \right. \\ \left. + \frac{2}{\Delta_n^2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle nn_o \rangle}{\Delta_n} + \frac{1}{\Delta_n} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle nn_o \rangle}{\Delta_n^2} \right\}$$

$$K_{32n} = \bar{n}^3 \frac{\langle nn_o \rangle}{\Delta_n^2}$$

$$K_{33n} = -\bar{n}^3 \left\{ \sum_{l, k \neq n_o} \frac{\langle nl \rangle \langle lk \rangle \langle kn_o \rangle}{\Delta_n \Delta_l \Delta_k} + \sum_{l \neq n_o} \left(- \frac{\langle nn_o \rangle \langle n_o l \rangle \langle ln_o \rangle}{\Delta_n^2 \Delta_l} \right. \right. \\ \left. + \frac{1}{\Delta_n} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle nl \rangle \langle ln_o \rangle}{\Delta_n \Delta_l} + \frac{\langle nl \rangle}{\Delta_n \Delta_l} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle ln_o \rangle}{\Delta_l} \right) \\ \left. + \frac{1}{\Delta_n} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{\Delta_n} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\langle nn_o \rangle}{\Delta_n} \right) \right\}$$

Anhang D: Matrixelemente der vier-Quasiteilchen-Zustände

Der Überlapp zwischen zwei vier-Quasiteilchen-Zuständen beträgt nach (6.16)

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta | \kappa\lambda\mu\nu \rangle = \langle \text{BCS} | \alpha_{\alpha} \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \alpha_{\delta} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\nu}^{\dagger} | \text{BCS} \rangle \quad (\text{D.1})$$

Die Kombination aus acht Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren ist zur Berechnung in ein Normalprodukt zu verwandeln, wobei gemäß dem Wickschen Theorem⁶ gilt

$$N(\text{ABC...XYZ}) = (-1)^{a+b+c+\dots} N(\text{AZ}) \cdot N(\text{BY}) \cdot N(\text{CX}) \cdot \dots \quad (\text{D.2})$$

a, b, c, ... gibt dabei die Zahl der Transpositionen an, die nötig sind, um von der Form (...O_i...O_j...) auf die Form (O_iO_j.....) zu kommen. Damit erhält man aus (D.1)

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta | \kappa\lambda\mu\nu \rangle = \langle \text{BCS} | N(\alpha_{\alpha} \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \alpha_{\delta} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{\lambda}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\nu}^{\dagger}) | \text{BCS} \rangle \quad (\text{D.3})$$

Berücksichtigt man, daß nach (6.9) und (6.13) nur Zustände der Form $\kappa = -\lambda$ auftreten können, so hat man schließlich

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta | \kappa - \kappa \mu - \mu \rangle = \langle \text{BCS} | N(\alpha_{\alpha} \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \alpha_{\delta} \alpha_{\kappa}^{\dagger} \alpha_{-\kappa}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{-\mu}^{\dagger}) | \text{BCS} \rangle \quad (\text{D.4})$$

Explizit sieht dieses Normalprodukt folgendermaßen aus:

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta | \kappa - \kappa \mu - \mu \rangle = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4 \quad (\text{D.5})$$

mit

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \Delta_{11} + \Delta_{12} + \Delta_{13} + \Delta_{14} + \Delta_{15} + \Delta_{16} \\ &= \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &\quad - \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &\quad - \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &\quad + \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \\ &\quad + \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &\quad - \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

$$\Delta_2 = \Delta_{21} + \Delta_{22} + \Delta_{23} + \Delta_{24} + \Delta_{25} + \Delta_{26}$$

$$\begin{aligned} &= -\delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &+ \delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &+ \delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &- \delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta\kappa} \\ &- \delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &+ \delta_{\alpha-\kappa} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta\kappa} \end{aligned}$$

$$\Delta_3 = \Delta_{31} + \Delta_{32} + \Delta_{33} + \Delta_{34} + \Delta_{35} + \Delta_{36}$$

$$\begin{aligned} &= \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &- \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \\ &- \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta-\mu} \\ &+ \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\mu} \cdot \delta_{\delta\kappa} \\ &+ \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \\ &- \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta-\mu} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta\kappa} \end{aligned}$$

(D.6)

$$\Delta_4 = \Delta_{41} + \Delta_{42} + \Delta_{43} + \Delta_{44} + \Delta_{45} + \Delta_{46}$$

$$\begin{aligned} &= -\delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &+ \delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta\kappa} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \\ &+ \delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta\mu} \\ &- \delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta\kappa} \\ &- \delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma\kappa} \cdot \delta_{\delta-\kappa} \\ &+ \delta_{\alpha-\mu} \cdot \delta_{\beta\mu} \cdot \delta_{\gamma-\kappa} \cdot \delta_{\delta\kappa} \end{aligned}$$

Berücksichtigt man weiter, daß sich bei Vertauschung von $\alpha_{\kappa}^{\dagger}$ mit $\alpha_{-\kappa}^{\dagger}$ bzw. $\alpha_{\mu}^{\dagger}$ mit $\alpha_{-\mu}^{\dagger}$ das Vorzeichen ändert, nicht hingegen bei Vertauschung von κ mit μ und $-\kappa$ mit $-\mu$, dann sieht man aus (D.5), daß für die dort mit Δ_i abgekürzten Terme gilt

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \Delta_2 & \kappa &\leftrightarrow -\kappa \\ \Delta_2 &= \Delta_3 & \kappa &\leftrightarrow -\mu \\ \Delta_3 &= \Delta_4 & \mu &\leftrightarrow -\mu\end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 \quad (D.7)$$

Das bedeutet aber, daß die Reihenfolge, in der (D.4) in Normalprodukte je zweier Operatoren zerlegt wird, egal ist und somit nur einer der in (D.5) mit Δ abgekürzten Ausdrücke, z.B. Δ_1 , berücksichtigt werden muß. Eine ähnliche Überlegung für die Δ_{1i} zeigt dann, daß gilt

$$\begin{aligned}\Delta_{11} &= -\Delta_{12} & \mu &\leftrightarrow -\mu \\ \Delta_{13} &= \Delta_{14} & -\kappa &\leftrightarrow -\mu \\ \Delta_{15} &= \Delta_{16} & \kappa &\leftrightarrow -\mu\end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \Delta_{11} - \Delta_{12} - \Delta_{13} + \Delta_{14} + \Delta_{15} - \Delta_{16} \\ &= \Delta_{11} + \Delta_{11} - \Delta_{13} + \Delta_{13} + \Delta_{15} - \Delta_{15} = 2\Delta_{11}\end{aligned} \quad (D.8)$$

Für den gesuchten Überlapp hat man schließlich

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta | \kappa \kappa \mu \mu \rangle = \delta_{\alpha\kappa} \cdot \delta_{\beta-\kappa} \cdot \delta_{\gamma\mu} \cdot \delta_{\delta-\mu} \quad (D.9)$$

Literaturhinweise

- 1) J.M. Araújo, Nucl.Phys. 1 (1956) 259; Nucl.Phys. 13 (1959) 360
- 2) M. Barangar and K. Kumar, Nucl.Phys. A122 (1968) 241
- 3) G. Baumgärtner, P. Schuck, Kernmodelle, Bibliogr. Inst, Mannheim (1968), Kapitel VII
- 4) S.T. Belyaev, Mat.Fys. Medd.Dan.Vid.Selsk 31 no.11 (1959)
- 5) S.T. Belyaev, Nucl.Phys. 220 (1974) 404
- 6) S.M. Bilenky, Introduction to Feynman Diagrams, Pergamon Press, Nex York (1974)
- 7) A. Bohr and B.R. Mottelson, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 30 no. 1 (1955)
- 8) E.F.Chaffin and F. Dickmann, Phys.Rev.Lett. 37 (1976) 1738
- 9) J.M. Eisenberg and W. Greiner, Nuclear Theory, vol. 3 (North-Holland, Amsterdam, 1970), § 10.2.1
- 10) H.J. Fink, W. Greiner, R.K. Gupta, S. Liran, H.J. Maruhn, W. Scheid, and O. Zohni, Theory of Fragmentation in Nuclear Fission and Nucleus-Nucleus Collisions, preprint, Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main, to be published in the Proc.Int.Conf. on Reactions between Complex Nuclei, Nashville, Tenn. 1974; S. Liran et al., to be published
- 11) M.J. Giannoni, F. Moreau, P. Quentin, D. Vautherin, M. Veneroni and D.M. Brink, preprint, Institut de Physik Nucléaire, Orsay (1976)
- 12) J. Grumann, Doctor thesis, Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main (1973)
- 13) S.M. Harris, Phys.Rev. 138 (1965) B509
- 14) H. Hofmann and K. Dietrich, Nucl. Phys. A165 (1971) 1
- 15) H. Hofmann, Cranking-Model Approach for Collective Dynamics at Finite Temperature, preprint Phys. Department Universität München (1975)

- 16) D.R. Inglis, Phys.Rev. 96 (1954) 1059
- 17) D.R. Inglis, Phys.Rev. 97 (1955) 701; Phys.Rev. 103 (1956) 1786; Nucl.Phys. 8 (1958) 125
- 18) E.R. Marshalek and J.O. Rasmussen, Nucl.Phys. 43 (1963) 438
- 19) S. Liran, **preprint**, Technion-Israel Inst. of Technology, Haifa (1976)
- 20) J. Maruhn, W. Greiner, Z.Physik 251 (1972) 431
- 21) J. Maruhn, Doktorarbeit, Universität Frankfurt am Main, Insti.f. theoretische Physik, (1973)
- 22) U. Mosel, J. Maruhn, W. Greiner, Phys.Lett. 34B (1971) 587
- 23) S.A. Maszkowski, Phys.Rev. 103 (1956) 1328; Handbuch der Physik, Herausgeber S. Flügge, Band 39 (Springer, Berlin 1957) S. 411
- 24) M.K.Pal, D. Zawischa, Z. Physik A272 (1975) 387
- 25) G.W. Parker, Am.J.Phys. 40 (1972) 120
- 26) K.H. Passler, U. Mosel, Nucl.Phys. A257 (1976) 242
- 27) B. Podolski, Phys.Rev.32 (1928) 812;
W. Pauli, Handbuch der Physik, Herausgeber H. Geiger und K. Scheel, Band 24 I (Springer, Berlin, 1933) S. 120
- 28) D.J. Rowe, R. Bassermann, Nucl.Phys. 220 (1974) 404
- 29) D.J. Rowe, R. Bassermann, Coherent State Theory of Large Amplitude Collective Motion, preprint, Toronto (1975)
- 30) L.I. Schiff, Quantum Mechanics, 3rd edition (Mc Graw-Hill, New York, 1968) § 31
- 31) V.M. Strutinski, Nucl.Phys. A95 (1967) 420
- 32) V.M. Strutinski, Nucl.Phys. A122 (1968) 1
- 33) F. Villars, Ann.Rev.Nucl.Sci. 7 (1957) 185
- 34) L. Wilets, Theories of Nuclear Fission (Clarendon Press, Oxford, 1964), § 4.5.2
- 35) L. Wilets and P.K. Haff, Fission: Theory and beyond, Preprint, University of Washington (1973); G. Schuette and L. Wilets, Viscosity in the Fission Process, preprint, University of Washington (1973)
- 36) L. Wilets, D.R. Tuerpe, P.K. Haff, Phys.Rev. C12 (1975) 2088
- 37) S. Liran, H.J. Scheefer, W. Scheid, and W. Greiner, Nucl. Phys. A248 (1975) 191

Lebenslauf

Ich wurde am 5. August 1949 in Hanau am Main als Sohn des Werner Scheefer und seiner Frau Elfriede geboren. 1954 zogen meine Eltern mit mir nach Frankfurt/Main, dort besuchte ich von 1956 bis 1960 die Friedrich-Ebert-Schule.

1960 zogen meine Eltern mit mir wieder nach Hanau, wo ich auch auf das Gymnasium, die Hohe Landesschule in Hanau, überwechselte. 1966 und 1967 beteiligte ich mich am Wettbewerb "Jugend forscht" und errang den zweiten bzw. 1967 den ersten Preis des Landes Hessen im Gebiet Physik.

1968 legte ich an der Hohen Landesschule mit Erfolg die Abiturprüfung ab und begann im gleichen Jahr mit dem Studium der Physik an der Johann-Wolfgang-Goethe Universität in Frankfurt am Main.

1970 legte ich mit Erfolg die Vordiplomprüfung ab, 1972 folgte die Diplomprüfung. Während meines Studiums erhielt ich ein Stipendium der Studienstiftung des deutschen Volkes.

Im Frühjahr 1973 begann ich mit der Arbeit an meiner Dissertation. Im August 1976 verlegte ich meinen Wohnsitz nach Frankfurt. Seit Februar 1977 arbeite ich als Studienreferendar am Seminar Frankfurt I.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren

W. Greiner, W. Martienssen, E. Schopper, G. Köthe,
M. Reichert, W. Scheid, F. Stummel, B. Mrowka, J. Kummer,
H. Müser und W. Gleissberg

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Cr. W. Greiner, danke ich für die Anregung und Unterstützung dieser Arbeit.

Herr Prof. Dr. W. Scheid hat die Arbeit durch wertvolle Diskussionen und Ratschläge entscheidend beeinflußt.

Ferner danke ich allen meinen Kollegen vom Institut für Theoretische Physik, insbesondere Herrn Liran und Volker Oberacker.

Frau Utschig danke ich für die Anfertigung der zahlreichen Zeichnungen und Herrn Brose für den Druck der Arbeit.

Die numerischen Rechnungen wurden am Hochschulrechenzentrum der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität in Frankfurt/Main durchgeführt.

